Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

d^3f - Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen

Abschlußbericht

GRS - 139

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH

d^3f - Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen

Zusammengestellt und bearbeitet von
Eckhard Fein und
Anke Schneider

Braunschweig

Oktober 1999

Anmerkung:

Die diesem Bericht zugrundeliegenden Arbeiten wurden mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) unter dem Förderkennzeichen FKZ 02 C 0465 0 mit dem Titel “Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte” gefördert. Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH bzw. in ihrem Auftrage durchgeführt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt allein bei den Autoren.

GRS - 139

ISBN 3-923875-97-5

Danksagung

An dieser Stelle möchten wir all jenen danken, die durch ihre Arbeit zum erfolgreichen Abschluß des Projektes “Entwicklung eines schnellen Programmes zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte” und zum Zustandekommen dieses Berichtes beigetragen haben. Zu nennen sind dabei an erster Stelle die Mitarbeiter der Arbeitsgruppen von Prof. W. Kinzelbach an der ETH Zürich, Prof. P. Knabner an der Universität Erlangen-Nürnberg, Prof. D. Kröner an der Universität Freiburg, Prof. M. Rumpf an der Universität Bonn, Prof. G. Wittum an der Universität Stuttgart und Prof. W. Zielke an der Universität Hannover. Bei ihnen bedanken wir uns für die konstruktive Zusammenarbeit und ihr persönliches Engagement, das weit über eine normale Erfüllung vertraglich vereinbarter Arbeitsaufgaben hinausging. Besonderer Dank gebührt dabei Herrn K. Johannsen von der Universität Stuttgart für die Koordination der engen Zusammenarbeit der einzelnen Arbeitsgruppen. Bedanken möchten wir uns auch bei den Mitarbeitern der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, des Bundesamtes für Strahlenschutz und der Abteilung Endlagerung des Fachbereiches Entsorgung der GRS, die beratend tätig waren. Schließlich danken wir auch Herrn W. Brewitz, Herrn W. Thomas und Herrn R. Storck von der GRS sowie Herrn W. Steininger vom Projektträger Entsorgung des Forschungszentrums Karlsruhe, die sich sehr dafür einsetzten, daß dieses Projekt durchgeführt werden konnte.

Eckhard Fein, Anke Schneider

Abstract

Salt has been selected as a potential host medium for radioactive and toxic waste disposal in Germany and a number of other countries. In Northern Germany the salinity of groundwater generally increases with depth, in some cases up to saturation. However, in the vicinity of salt domes brine is already encountered at low depth, eg in the Gorleben area approximately at 250 m below m s l. In these situations the groundwater flow and hence a potential radionuclide transport is strongly effected by variations of density and viscosity due to the presence of dissolved salt. Since the prediction of the radionuclide transport in the geosphere over thousands or even million of years is part of long term safety assessments, it is important to study groundwater flow modelling at high salinity. For that, flow models have to take into consideration the various effects of salinity. That means, they have to deal with strongly nonlinear coupled three-dimensional partial differential equations.

Additionally for realistic modelling of the hydrogeology of those sites heterogeneities and anisotropies have to be taken into account, eg permeability contrasts of several orders of magnitude and thin confining layers may occur. Besides the complex hydrogeological structure of the systems the models may cover areas up to 10 000 km^2 and extend up to 2 km in depth. Supplementary the assessment of the long term safety of disposal sites requires extremely long time periods to be modelled.

With the soft- and hardware previously available it was not possible to model the systems above described taking into account the effects of salinity. In general three-dimensional model calculations could only be performed with the simplifying assumption of constant water density. Variable density could be accounted for in two-dimensional models only.

In order to remedy this insufficiency a fast computer code named d^3f (**d**istributed **d**ensity **d**riven **f**low) was developed. In contrast to the other codes already existing hydrogeological units have only to be defined by structure contour maps or cross sections. Hydrogeological parameters as for instance permeabilities, porosities and tortuosities may be defined as spatial functions. High importance was attached to numerical algorithms. Linear and nonlinear solving strategies based on unstructured grids were implemented as well as adaptivity in space and time controlled by quantitative error estimators allowing refine-

ment and coarsening, respectively. Multigrid techniques are used as fast solvers. In addition to serial computing the code can be run on massively parallel computers. Graphically interactive pre- and postprocessing tools were developed.

After completion of the developmental work, the d^{3}f program package offers a tool to model large, hydrogeologically complex regions. With the use of massively parallel computers, the computing time can also be kept within acceptable limits with this program. The numerous test calculations and applications performed are documented in this final report.

Future application fields for d^{3}f include the following problems: Modelling of salt water intrusion in coastal areas or the ascent of salt water into wells (upconing), and groundwater movements in the region surrounding salt domes. Despite the progress achieved in the field of density driven flow modelling by the development of d^{3}f, such modelling still represents a challenge to modellers and hardware, even though many problems can now be solved.

Vorwort

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) in der Zeit vom 1. Oktober 1994 bis 31. Dezember 1995 unter dem Förderkennzeichen 02 C 0254 6 und in der Zeit vom 1. Januar 1996 bis 31. August 1998 unter dem Förderkennzeichen 02 C 0465 0 gefördert. Die hier beschriebenen Arbeiten wurden von der GRS und in ihrem Auftrag von einer Arbeitsgruppe aus Mitarbeitern verschiedener Hochschulen durchgeführt. Dieser Arbeitsgruppe gehörten Mitglieder des Instituts für Hydromechanik und Wasserwirtschaft der ETH-Zürich (Prof. Dr. W. Kinzelbach), des Institutes für Angewandte Mathematik der Universität Erlangen-Nürnberg (Prof. Dr. P. Knabner), des Institutes für Angewandte Mathematik der Universität Freiburg (Prof. Dr. D. Kröner), des Institutes für Angewandte Mathematik der Universität Bonn (Prof. Dr. M. Rumpf), des Institutes für Computeranwendungen 3 der Universität Stuttgart (Prof. Dr. G. Wittum) und des Institutes für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen der Universität Hannover (Prof. Dr. W. Zielke) an.

Der vorliegende Abschlußbericht basiert auf den Endberichten der beteiligten Institutionen [86], [55], [15], [16] und [131]. In diesen Abschlußbericht wurden Teile der Endberichte übernommen, die redaktionell durch die GRS überarbeitet und mit Ergänzungen versehen wurden. Für diesen Abschlußbericht wurden Beiträge von folgenden Autoren herangezogen:

- Wollfgang Kinzelbach, Sascha Oswald, Carsten Schwarz
- Thomas Rother
- Christoph Tapp, Peter rolkovič, Kathrin Thiele, Peter Knabner
- Gabriele Beddies, Klaus Johannsen, Stefan Lang
- Joachim Becker

Neben diesem Abschlußbericht wurden gemeinsam von allen Beteiligten ein Benutzerhandbuch “d^3f - A Simulator for Density-Driven Flow. User’s manual.” [36] und eine Testfallbibliothek “d^3f - A Simulator for Density-Driven Flow. Test Case Library.” [37] in englischer Sprache erstellt.

Inhaltsverzeichnis

Abstract ..... **I**

Vorwort ..... **III**

Inhaltsverzeichnis ..... **V**

1 Einleitung **1**

2 Aufgabenstellung **7**

2.1 Stand der Dichteströmungsmodellierung zu Projektbeginn 8

2.2 Ziel der Programmentwicklung 11

3 Organisation und Management der Softwareentwicklung **15**

4 Physikalisches Modell und mathematische Beschreibung **17**

4.1 Die partiellen Differentialgleichungen 18

4.2 Der Charakter der Gleichungen 20

4.3 Der Dispersionstensor 22

4.4 Anfangs- und Randbedingungen 26

4.4.1 Anfangsbedingungen 26

4.4.2 Randbedingungen 27

4.5 Zustandsgleichungen und Materialeigenschaften 32

4.5.1 Die Dichte 33

4.5.2 Die Viskosität 35

4.5.3 Die Hydrogeologischen Parameter 37

5 Das Programmsystem d^3f **39**

5.1 Die Programm-Schnittstellen 39

5.1.1 Präprozessor - Simulator 39

5.1.2 Simulator - Postprozessor 39

5.2 Der Präprozessor 40

5.2.1 Basisdaten 41

5.2.2 Datenaufbereitung 42
5.2.2.1 Analyse von Vertikalschnitten 43
5.2.2.2 Analyse von Tiefenlinienplänen 44
5.2.3 Zweidimensionale Modelle 46
5.2.4 Dreidimensionale Modelle 47
5.2.5 Graphische Oberfläche 50
5.3 Der Simulator d^3f 51
5.3.1 Gittergenerator 52
5.3.1.1 Realisierte Lösung 54
5.3.1.2 Advancing Front 54
5.3.1.3 Oberflächentriangulierung 55
5.3.1.4 Schrittweitenfunktion 56
5.3.1.5 Triangulierung dünner Schichten 56
5.3.1.6 Zusammenfassung 57
5.3.2 Diskretisierung 58
5.3.2.1 Approximation der Konzentration 60
5.3.2.2 Geschwindigkeitsapproximation 62
5.3.2.3 Entwicklungen und Ergebnisse 63
5.3.2.3.1 Minimum/Maximum-Prinzip 65
5.3.2.3.2 Upwind-Methoden 66
5.3.2.3.1 Diskretisierung des Darcyschen Gesetzes 68
5.3.2.3.2 Konsistente Geschwindigkeitsapproximation 69
5.3.2.4 Zusammenfassung 72
5.3.3 Fehlerschätzer 74
5.3.3.1 Theoretische Grundlagen 74
5.3.3.2 Softwareentwicklung 76
5.3.3.3 Algorithmusuntersuchungen 77
5.3.3.4 Zusammenfassung 79
5.3.4 Lösungsalgorithmen für Dichteströmungen 80
5.3.4.1 Effiziente Löser für Dichteströmungen 80
5.3.4.2 Die Behandlung der Dispersion 87
5.3.4.3 Aligned Finite Volumen 88
5.3.5 Parallelisierung adaptiver Mehrgitterverfahren 89
5.3.5.1 Konzept für die Parallelisierung 91

5.3.5.2 Lastverteilung 92
5.3.5.3 Lastmigration 93
5.3.5.4 Transparenz 94
5.3.5.5 Der Verfeinerungsalgorithmus 94
5.3.6 Zufallsgenerator für stochastische Modellierungen der Permeabilität 95
5.3.7 Singuläre Quellen und Senken 99
5.3.8 Integrierte Oberfläche 102
5.3.9 Verifizierung 102
5.4 Der Postprozessor 104
5.4.1 Darstellungen von Daten 105

6 Verifizierung der Numerik 109
6.1 Das Problem Hydrocoin, Level 1, Case 5 109
6.2 Das Henry Problem 111
6.3 Das Elder Problem 114
6.3.1 Problemformulierung 115
6.3.2 Volumenerhaltung beim Elder-Problem 117
6.3.3 Stabilität der Lösung 119
6.3.4 Eindeutigkeit der stationären Lösung 121
6.4 Benchmarking mit vorgegebener Lösung 124

7 Neue physikalische Testfälle in 3D 133
7.1 Experimentelles Verfahren 134
7.2 Saltpool Testfall: Upconing 137
7.2.1 Aufbau und Ablauf des Experiments 139
7.2.2 Messung der Saltpool Testfälle 140
7.2.2.1 Meßresultate Versuch a 140
7.2.2.2 Meßresultate Versuch b 142
7.2.2.3 Messung von Streichlinien 144
7.2.3 Simulation der Saltpool Testfälle mit d^3f 146
7.2.3.1 Modellierung 146
7.2.3.2 Ergebnisse 147
7.3 Fingering 148
7.3.1 Aufbau und Ablauf des Experiments 151

7.3.2 Messung der Fingering Testfälle 152
7.3.3 Simulation des Fingering Testfalls mit d^{3}f 153
7.4 Vergleich mit anderen Rechencodes 155
7.4.1 Rechnungen zum Saltpool-Testfall 155
7.4.2 Rechnungen zum Fingering-Testfall 159
7.4.3 Zusammenfassung 160

8 Dichteströmungen in heterogenen Aquifern 163
8.1 Layered-Saltdome - Testfall für mittel- und großskalige Heterogenitäten 164
8.2 Heterogenität bei Meerwasserintrusion 166
8.3 Salzfinger in heterogenen Medien 170

9 Realitätsnahe Testfälle 175
9.1 Meeresinsel Weizhou mit Meerwasserintrusion 175
9.1.1 Beschreibung von Weizhou 176
9.1.2 Vorgehen zur Simulation von Weizhou mit d^{3}f 176
9.1.3 Simulation und Ergebnisse 180
9.2 Palla Road Aquifer (Botswana) mit seitlicher Salzwasserintrusion 183
9.2.1 Beschreibung des Palla Road Aquifers 183
9.2.2 Vorgehen zur Simulation des Palla Road Aquifers mit d^{3}f 184
9.2.3 Simulation und Ergebnisse 188

10 Rechenzeiten 193
10.1 Rechenzeitvergleich zwischen d^{3}f und Saltflow 193
10.2 Leistungsfähigkeit von d^{3}f 196

11 Zusammenfassung und Ausblick 199
11.1 Der Entwicklungsstand von d^{3}f 199
11.2 Verifizierung von d^{3}f 202
11.3 Feldanwendungen 204
11.4 Vorteile von d^{3}f gegenüber anderen Dichteströmungsprogrammen 204
11.5 Wünschenswerte Weiterentwicklungen von d^{3}f 205
11.6 Resümee 206

12 Literatur 209

13 Notation 229

14 Veranstaltungen 231

15 Veröffentlichungen 233
15.1 Paper 233
15.2 Poster 234
15.3 Dissertationen 235

Abbildungsverzeichnis 237

Tabellenverzeichnis 240

Stichwortverzeichnis 241

1 Einleitung

Dichtebeeinflußte Grundwasserströmungen treten in den verschiedensten Bereichen auf und sind deshalb von erheblichem Interesse. So können in Küstengebieten durch technische Maßnahmen, wie Trinkwassergewinnung, Bewässerung und Abpumpen von Poldergebieten, Veränderungen in den Grenzbereichen zwischen Salz- und Süßwasser entstehen. Auf vielen Inseln sind die Bewohner zur Deckung ihres Trinkwasserbedarfs auf die Vorräte in Süßwasserlinsen unter den Inseln angewiesen. Durch übermäßige Wasserentnahme kann es, auch wenn die Brunnen nur im Süßwasserbereich verfiltert sind, leicht zum Aufstieg von Salzwasser, dem sogenannten Upconing, in der Umgebung von Entnahmebrunnen kommen. Dieses führt letztlich dazu, daß die Brunnen nur noch versalzenes Wasser fördern und damit nicht mehr brauchbar sind. In Deutschland sind Salzstöcke als Wirtsgestein für die Endlagerung von gefährlichen Abfällen vorgesehen. Deshalb kommt den Dichteströmungen in der Umgebung der Salzstöcke eine besondere Bedeutung zu. Ein weiterer wichtiger Bereich ist die Geothermie, bei der Dichteänderungen durch Temperaturunterschiede hervorgerufen werden. Um eine langfristige Wärmeentnahme zu gewährleisten, müssen die entnommenen Wassermengen so bemessen werden, daß die Aufrechterhaltung der Temperaturverteilung im Entnahmebrunnen gewährleistet ist.

In allen erwähnten Bereichen ist eine belastbare Simulation des Dichteströmungsfeldes für eine nachhaltige Wasserbewirtschaftung bzw. für einen Langzeitsicherheitsnachweis unabdingbar. Die Rückkopplung des Salz- bzw. Wärmetransportes auf die das Salz bzw. die Wärme transportierende Strömung bewirkt besondere Eigenschaften von Dichteströmungen, die aus der gewöhnlichen Potentialströmung nicht bekannt sind. So können in Dichteströmungen Walzen mit geschlossenen Stromlinien und Gravitationsinstabilitäten (Fingering) auftreten. Diese Phänomene erfordern eine genaue Lösung der Strömungsgleichungen, wie aus offenen strittigen Fragen im Zusammenhang mit Testrechnungen zur Überströmung eines Salzstockes ersichtlich ist [74], [112].

Im Zusammenhang mit der Endlagerung von gefährlichen Abfällen ist die Grundwasserströmung im Deckgebirge über den Salzstöcken und als Folge davon auch ein möglicher Transport von radioaktiven oder chemotoxischen Schadstoffen nach einer störfallbeding-

ten Freisetzung aus dem Salzstock von besonderer Bedeutung. Die Simulation des Schadstofftransportes und damit auch die Berechnung der Grundwasserströmung über Tausende von Jahren sind Bestandteile einer Langzeitsicherheitsanalyse [27], [145].

Um diesen Anforderungen nachkommen zu können, wurde in der Zeit vom November 1990 bis September 1991 im Rahmen eines BMFT-geförderten FE-Vorhabens von einer Arbeitsgruppe, die sich aus Mitarbeitern des Bundesamtes für Strahlenschutz (BfS), der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS) und der GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit (GSF) zusammensetzte, der “Statusreport: Grundwasserprogramme mit variabler Dichte” [45] erstellt. In diesem wurden die fachlichen Grundlagen für eine Entscheidung über die Entwicklung eines Grundwasserprogrammes, mit dem Strömungen von versalzenen Grundwassern in großen, komplexen Gebieten berechnet werden können, zusammengestellt. In Abstimmung zwischen den oben genannten Institutionen wurden die Anforderungen an ein schnelles Grundwasserprogramm im Hinblick auf die Strömungsverhältnisse über Salzstöcken definiert. Außerdem wurden die Möglichkeiten entsprechender, national und international bereits existierender Programme aufgezeigt, sowie der damalige Stand von Numerik und Hardware bezüglich der Schnelligkeit und Effizienz der Rechenprogramme ausgewiesen.

Der “Statusreport” [45] diente vorrangig der Information des BMFT und des BMFT-Sachverständigenkreises “Endlagerung”, um Einvernehmen über das weitere Vorgehen zu erreichen. Er enthielt folgende Empfehlung der beteiligten Institutionen und des BfS für das zukünftige Vorgehen bei der Bereitstellung eines speziellen Grundwasserprogrammes zur Berücksichtigung der Versalzung:

- Die Hauptanforderungen an ein schnelles Grundwasserprogramm sind Effizienz und Rechengeschwindigkeit. Diese sind nur durch Anwendung von Mehrgitterverfahren, aufbauend auf einer Finite-Volumen-Diskretisierung, und unter Nutzung moderner Parallelrechnerarchitekturen zu erfüllen. Keines der untersuchten Programme ist in dieser Hinsicht zur Weiterentwicklung zu einem schnellen Grundwasserprogramm mit Berücksichtigung von Dichteeffekten geeignet. Eine Anpassung an diese Verfahren kommt einer Neuentwicklung gleich. Deshalb ist ein Programm, das diese Anforderungen erfüllt, zweckmäßigerweise neu zu entwickeln.

- Unabhängig von dieser Neuentwicklung eines Spezialprogrammes wird die Weiterentwicklung und Pflege von bereits vorhandenen, übergreifend einsetzbaren Programmen zur Untersuchung verschiedener Einzeleffekte, die das geforderte schnelle Programm nicht enthalten wird, als unbedingt notwendig erachtet. Solche Programme sind auch für begleitende Rechnungen bei der Entwicklung des neuen Grundwasserprogramms erforderlich. Sie dienen dabei der Verifizierung des neuen Programmes. Andererseits werden sie auch für die Bereitstellung von speziellen Eingabeparametern zur Berücksichtigung von Spezialeffekten benötigt, die in dem schnellen Programm nicht enthalten sind.

Im Anschluß daran wurde in dem Bericht “Strategie zur Entwicklung eines schnellen Grundwasserprogramms mit variabler Dichte” [46] das Vorgehen zur Umsetzung dieser Empfehlungen einschließlich grober Abschätzungen von Personalaufwand und Kosten zusammengestellt.

Auf dem BMFT-Workshop “Grundwasserprogramme” vom 3. - 4. November 1992 in Freudenstadt wurden die Aussagen des oben erwähnten Statusberichts von den Teilnehmern von AEA (Atomic Energy Authority, Decomissioning & Radwaste, Harwell, UK), BfS, BGR, BMFT (Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie), GRS, GSF, IfE (Institut für Energetik, Dresden/Leipzig), KfK (Kernforschungszentrum Karlsruhe, Projektträger des BMFT für Entsorgung), Universität Hannover (Institut für Strömungsmechanik und elektronisches Rechnen im Bauwesen) und Universität Heidelberg (Institut für Angewandte Mathematik) im vollen Umfang bestätigt. Insbesondere wurde festgestellt, daß die Berücksichtigung der Dichteeffekte für ein belastbares Grundwassermodell notwendig ist, und daß die bisherigen Erkenntnisse ein dreidimensionales Modell zur Nachbildung der wichtigsten Vorgänge erfordern. Von der Weiterentwicklung bereits vorhandener Programme wurde allgemein keine ausreichende Beschleunigung der Rechenleistung, wie sie für komplexe Modellgebiete notwendig ist, erwartet. Somit wurde die Neuentwicklung eines schnellen Grundwasserprogramms erforderlich. Dabei wurde eine Begleitung der Entwicklungsarbeiten durch die Institutionen, die dieses Grundwasserprogramm zukünftig vorwiegend anwenden würden, als wichtig erachtet. Im Hinblick auf eine zügige Realisierung wurde die Erarbeitung des fachlichen Feinkonzepts empfohlen, das später der Erstellung fachlicher Unterlagen zur Ausschreibung und Einholung von Angeboten für die Programmentwicklung dienen sollte.

Von Januar bis Mai 1993 wurde das fachliche Feinkonzept [47] erarbeitet und im Entwurf am 3. und 4. Juni 1993 auf einem zweiten BMFT-Workshop in Freudenstadt vorgestellt und diskutiert. Die Ergebnisse sind im folgenden kurz zusammengefaßt:

- Die grundsätzliche Notwendigkeit einer Neuentwicklung wurde entsprechend den Ergebnissen des ersten Workshops nicht in Frage gestellt. Jedoch wurden einzelne inhaltlichen Anforderungen erneut intensiv diskutiert, um letztlich die bereits formulierten Anforderungen zu bestätigen. So wurde die Großräumigkeit und Komplexität des zu behandelnden Modellgebiets durch die Spezifikation einer erforderlichen Knotenzahl von größenordnungsmäßig 10^7 untermauert.
- Der Geschwindigkeitsgewinn eines neuentwickelten Programms gegenüber den damals aktuellen Programmen wurde sowohl als Beschleunigungsfaktor in der Größenordnung von 1000 als auch als maximale Laufzeit einer Modellrechnung von 24 Stunden diskutiert. Die Vorgabe eines Beschleunigungsfaktors wurde als nicht sinnvoll erachtet, da damalige Programme auf Gitternetze mit mehreren Millionen Knoten praktisch nicht anwendbar waren. Somit sollte die maximale Laufzeit im Sinne einer größenordnungsmäßigen Anforderung verstanden werden.
- Die Erfolgsaussichten der Neuentwicklung, insbesondere im Hinblick auf den zu erzielenden Geschwindigkeitsgewinn, wurden bei den einzusetzenden numerischen Verfahren als gut angesehen. Um zukünftige Fortschritte bei der Entwicklung numerischer Verfahren berücksichtigen zu können, sollte die Charakterisierung des einzusetzenden numerischen Verfahrens als Minimalanforderung verstanden werden.

Nach einer Sitzung des Sachverständigenkreises Endlagerung (SKE) im September 1993 wurde das Institut für Tieflagerung der GSF (jetzt Fachbereich für Endlagersicherheitsforschung der GRS) vom Projektträger Entsorgung (PTE) aufgefordert, einen entsprechenden Projektantrag zu stellen. Dieser wurde im April 1994 abgegeben und mit Schreiben des BMFT vom 15. September 1994 bewilligt.

Der vorliegende Abschlußbericht ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 2 werden der Entwicklungsstand auf dem Gebiet der Dichteströmungsmodellierung zu Projektbeginn und das daraus abgeleitete Ziel der Programmentwicklung dargestellt. Kapitel 3 zeigt die Organisation und das Management der Softwareentwicklung. Kapitel 4 enthält das physikali-

sche Modell und seine mathematische Beschreibung. In Kapitel 5 wird das Programmsystem d^3f mit den Entwicklungsbeschreibungen des Präprozessors, des Simulators und des Postprozessors vorgestellt. In Kapitel 6 sind die Arbeiten zur Verifizierung der Numerik dokumentiert. Die Arbeiten zur Erstellung dreidimensionaler Testfälle sind in Kapitel 7 und die Simulation von Dichteströmungen in heterogenen Aquiferen in Kapitel 8 dargestellt. Kapitel 9 enthält die realitätsnahen Testfälle. Ein Rechenzeitvergleich wird in Kapitel 10 beschrieben. Eine Zusammenfassung und ein kurzer Ausblick, der auch sinnvolle Weiterentwicklungsmöglichkeiten aufzeigt, werden in Kapitel 11 gegeben. Kapitel 12 enthält das Literaturverzeichnis und Kapitel 13 die Bezeichnungen, während in den Kapiteln 14 und 15 Veranstaltungen bzw. Veröffentlichungen aus der Laufzeit des Projektes zusammengestellt sind.

2 Aufgabenstellung

Der bisher in Grundwassermodellrechnungen verwendete vereinfachende Ansatz mit Wasser konstanter Dichte (Süßwasser) führt im allgemeinen im Salzwasserbereich zu größeren berechneten Fließgeschwindigkeiten und damit im Sinne einer konservativen Betrachtungsweise zu kürzeren konvektiven Transportzeiten für Radionuklide. Derartige Rechnungen sind jedoch oft weit von der Realität entfernt und können unter Umständen auch zu nicht konservativen Ergebnissen bezüglich der potentiellen Ingestionsdosis führen.

Die Anforderungen, die prinzipiell an Modelle für Dichteströmungen gestellt werden müssen, ergeben sich aus den realen Bedingungen, die in den die Salzstöcke umgebenden Grundwassersystemen vorliegen. Neben den komplexen hydrogeologischen Gegebenheiten sind dabei Ablaugungsvorgänge, Einflüsse von Temperatur- und Salinitätsänderungen, Diffusionsvorgänge u. ä. zu berücksichtigen. Für die numerische Modellierung dieser Systeme stellen drei nichtlinear gekoppelte, zeitabhängige, partielle Differentialgleichungen für Strömung, Transport des gelösten Salzes und Transport der Energie die physikalischen Grundlagen dar. Diese Gleichungen können mit den unabhängigen Variablen Wasserdruck, Salzkonzentration und Temperatur formuliert werden. Die Kopplung erfolgt über Stoffgesetze für Dichte und Viskosität. Anfangsbedingungen für die drei Variablen sowie Randbedingungen, die jeweils für bestimmte Bereiche der Oberfläche des Modellgebietes definiert sind, müssen zur Lösung ebenfalls angegeben werden.

Das Gleichungssystem ist entsprechend den gegebenen Verhältnissen für große, geologisch komplexe Systeme dreidimensional und zeitabhängig, eventuell bis zum Erreichen stationärer Verhältnisse, zu lösen. Die hydrogeologische Situation (Permeabilitäten, Porositäten, Diffusivitäten und Dispersionslängen), die durch große Inhomogenitäten und starke Anisotropien geprägt sein kann, muß modelliert werden können. Dabei können z.B. Permeabilitätskontraste mehrere Größenordnungen betragen. Auch sind Quellen und Senken für Wasser und gelöstes Salz bei der Modellierung in Betracht zu ziehen.

2.1 Stand der Dichteströmungsmodellierung zu Projektbeginn

In den Jahren 1984 bis 1994 ist im Rahmen der hydrogeologischen Vergleichsrechnungen von Hydrocoin [156] und Intraval Phase 1 und Phase 2 [157], [44], [137] verstärkt an und mit Grundwassermodellen für Dichteströmungen gearbeitet worden. In Hydrocoin Level 1 wurde eine sehr einfache zweidimensionale Idealisierung (homogen, isotrop) eines Deckgebirges über einem Salzstock in Anlehnung an die Verhältnisse in Norddeutschland modelliert. Während im oberen Teil des Grundwasserleiters in diesen Modellrechnungen Süßwasser angetroffen wird, ist das Grundwasser in einer Tiefe von 300 m nahezu salzgesättigt. Die Ergebnisse der einzelnen Bearbeitergruppen mit verschiedenen Computerprogrammen unterscheiden sich teilweise beträchtlich. Es stellte sich heraus, daß dieser Testfall mit induzierter Konvektion zu kompliziert war. Dieser Testfall wurde in Level 3 nochmals aufgegriffen, um den möglichen Einfluß von Unsicherheiten in der Datenbasis zu untersuchen. In Level 2 wurde in einem anderen Testfall die freie Konvektion untersucht. Dabei machte man sich die Analogie von wärme- und konzentrationsinduzierten Dichteströmungen zunutze. Die physikalischen Eigenschaften des Experimentes von Elder [39], bei dem das zweidimensionale System von unten erhitzt wurde, wurden in ein äquivalentes System, bei dem an der Oberkante Salz in Lösung geht, transformiert. Da vom Experiment von Elder nur Abbildungen vorliegen, konnten bei diesem Testfall nur qualitative Vergleiche zwischen Rechnungen und Experiment gemacht werden.

Beim Testfall 13 des INTRAVAL-Projektes handelt es sich um Laborexperimente, die bei dem Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiene (RIVM) in den Niederlanden durchgeführt wurden. In einer quaderförmigen, vertikalen Säule wird Wasser niedriger Salzkonzentration von unten durch Salzwasser höherer Konzentration verdrängt. Durch Variation der Anzahl der Einlaßöffnungen im Boden der Säule konnten dabei sowohl eins- als auch zweidimensionale Dichteströmungen erzeugt werden. An verschiedenen Orten in unterschiedlichen vertikalen Abständen wurden Durchbruchskurven in Abhängigkeit von der Zeit gemessen. Die Simulationen der eindimensionalen Experimente führten zu dem Ergebnis, daß das 1. Ficksche Gesetz für die Dispersion bei hohen Salzkonzentrationsunterschieden erweitert werden muß. Die zweidimensionalen Experimente wurden nur von sehr wenigen Teilnehmern bearbeitet. Diese Rechnungen konnten nicht erfolgreich beendet werden.

Gleichzeitig wurden verstärkt Rechenprogramme mit Berücksichtigung von Dichteeinflüssen für Endlager-relevante Untersuchungen eingesetzt. Hierzu gehörten die Untersuchungen für die WIPP-Site (Waste Isolation Pilot Plant) in den USA [96] oder die Arbeiten des RIVM (RijksInstituut voor Volkgezondheid en Milieuhygiene) im Rahmen des EG-Projektes PAGIS [98].

Insbesondere wurden auch von der BGR Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte durchgeführt [136], [161], [137], [162], [163], [164] und [87]. Die ersten Arbeiten bezogen sich auf die Tiefenwasserbewegung für stark vereinfachte Modellschnitte aus dem Bereich der norddeutschen Tiefebene. Die Ergebnisse zeigten, daß in Salz-/Süßwassersystemen gänzlich andere Grundwasserströmungsmuster entstehen als in reinen Süßwassersystemen. Grundsätzlich kleinere Fließgeschwindigkeiten und das Vorkommen von Konvektionszellen kennzeichneten den Salzwasserbereich bei diffusiv dominiertem Stofftransport. Wegen des in diesem Tiefenwassersystem vorherrschenden diffusiven Transportes gestalteten sich die Modellrechnungen für solche Salzwassersysteme einfacher als für konvektiv dominierte Grundwassersyteme. Erste einfache Rechnungen, die im Zusammenhang mit dem Testfall “Gorlebener Rinne” im Rahmen von Intraval durchgeführt wurden, zeigten, daß die Ergebnisse sehr deutlich von der Durchlässigkeitsverteilung, den Anfangsbedingungen für die Salzkonzentration, der Größe der transversalen Dispersivität und des Salinarkontaktes sowie des zu betrachtenden Modellzeitraumes abhängen. Die Ergebnisse wiesen darauf hin, daß die heutige Salzwasserschichtung und das zugehörige Fließsystem noch nicht stationär sind. Untersuchungen zum Temperatureinfluß auf die Bewegung von Tiefenwasser haben eine nur untergeordnete Bedeutung für Salz-/Süßwassersysteme gezeigt.

Bezüglich der durchgeführten Rechnungen mit Dichteeffekten war festzustellen:

- Sie wiesen die Machbarkeit der Modellierung des Transports von Grundwasser und seiner Inhaltsstoffe bei von der Salzkonzentration abhängiger Wasserdichte in Hinblick auf komplexere Fälle auf. Sie zeigten gleichzeitig, daß für eine Anwendung der Rechenprogramme in Genehmigungsverfahren noch erheblicher Entwicklungsbedarf bestand.

- Sie belegten die herausragende Bedeutung des Einflusses des Salzgehaltes und der damit variablen Dichte auf das gesamte Grundwassersystem. Entsprechend geeignete Rechenprogramme würden die realistischere Modellierung von komplexen Fließsystemen ermöglichen.
- Sie zeigten bei Betrachtung der Ergebnisse, daß die vorhandenen Rechenprogramme an die Grenze ihrer Leistungsfähigkeit stießen und
  - bisher nur die Nachbildung ein- oder zweidimensionaler Modellstrukturen erlaubten,
  - über kleine Modellgebiete oder eine grobe Diskretisierung nicht hinauskamen,
  - nur einfachste hydrogeologische Modelle abbildeten, sowie
  - einen enormen Bedarf an Rechenzeit und Speicherkapazität hatten.

Auf dem Markt war eine Reihe von Grundwasserprogrammen verfügbar, in denen Gleichungen zur Simulation des Salztransports im Grundwasser implementiert waren. Mit diesen Rechenprogrammen konnten damals wegen des enormen Bedarfs an CP-Zeit und Speicherkapazität faktisch keine Grundwasserberechnungen unter Berücksichtigung der Salinität für große, dreidimensionale und komplexe geologische Gebiete durchgeführt werden. Für eine realitätsnahe Modellierung sind solche Berechnungen jedoch unerläßlich. Aus diesem Grund ist es unumgänglich, alle Möglichkeiten, die sowohl Rechnerarchitekturen (Vektorprozessoren, Parallelrechner) als auch numerische Verfahren boten, auszunutzen.

Die Durchführung von Rechnungen zum Salztransport im Grundwasser ist wegen der stark nichtlinearen Struktur des zugrundeliegenden Gleichungssystems ohne effiziente Lösungsverfahren sowie ohne Nutzung modernster Rechnerarchitekturen nicht durchführbar. Die Ausführungen der GMD/IfMG (Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung/Institut für methodische Grundlagenforschung) [25], die als Gutachter zu diesem Problem hinzugezogen wurden, stellten folgenden Sachverhalt fest: Für nichtlineare Gleichungssysteme kann mit Hilfe von Mehrgitterverfahren die notwendige Konvergenzbeschleunigung erreicht werden, um Salztransportrechnungen durchzuführen. Das ist durch andere Anwendungen für ebenfalls komplexe Modellstrukturen deutlich gezeigt worden. Diese Lösungsverfahren können auf der Basis einer Finite-Volumen-Diskretisierung so optimiert werden, daß die Merkmale der Parallelverarbeitung auf modernen Rechnerarchitekturen voll ausgenutzt werden.

Eine zusätzliche Reduzierung der benötigten Rechenoperationen kann durch die Verwendung adaptiver Gitter für die räumliche und zeitliche Diskretisierung erreicht werden [173], [50], [172], [128], [9]. Dadurch wird auch eine ökonomisch sinnvolle Durchführung einer Vielzahl von Rechnungen, wie sie z.B. für Sensivitätsanalysen notwendig sind, ermöglicht.

2.2 Ziel der Programmentwicklung

Unter Berücksichtigung der vorliegenden Ergebnisse und basierend auf den damaligen Erfahrungen mit Salz-/Süßwassermodellen ließ sich ein Katalog von Minimalanforderungen für ein Programm ableiten, das insbesondere in der Lage sein mußte, sowohl komplexe dreidimensionale hydrogeologische Strukturen als auch den Salzgehalt des Grundwassers zu berücksichtigen. Da infolge des Energietransports die temperaturinduzierten Strömungen kleiner sind als diejenigen in Folge von Konzentrationsänderungen, wurde auf die simultane Berechnung der Energieausbreitung verzichtet. Statt dessen sollte nur der Einfluß eines für jeden Zeitschritt fest vorgebbaren Temperaturfeldes auf die beiden Stoffgesetze, welche die Kopplung beschreiben, berücksichtigt werden. Somit wurde auf folgende Effekte verzichtet, um Machbarkeit und Rechenbarkeit unter den zur Zeit geltenden Software- und Hardwarebedingungen zu gewährleisten:

- Transportgleichung für die Energie
- Lösung der stationären Strömungs- und Transportgleichungen
- Strömungen in der ungesättigten Bodenzone
- Berücksichtigung von Einzeleffekten wie Kluftstrukturen, Retardation und Cauchysche Randbedingungen.

Aus diesen Anforderungen wurde das Ziel des geplanten Vorhabens**, die Erstellung eines Programmes, das in der Lage ist, in praktikablen Rechenzeiten die Grundwasserbewegung unter Berücksichtigung der Salinität für große, dreidimensionale und komplexe hydrogeologische Gebiete möglichst realitätsnah zu berechnen,** abgeleitet.

Insgesamt werden folgende im Statusreport [45] begründete Anforderungen an das Grundwasserprogramm gestellt:

- instationäre Strömung
- instationärer Transport von Salz
- räumlich variierendes, für jeden Zeitschritt vorgebbares Temperaturfeld
- Konvektion
- Ficksche Diffusion
- Dispersion
- 3-dimensional, 2-dimensional vertikal
- gesättigtes, poröses, heterogenes und anisotropes, inkompressibles Medium
- gespanntes Aquifersystem
- inkompressibles Fluid
- Stoffgesetze für Dichte und Viskosität in Abhängigkeit von der Konzentration des gelösten Salzes und der Temperatur
- Anfangsbedingungen für Druck und Konzentration
- Dirichletsche und Neumannsche Randbedingungen (Flußrandbedingungen) für Druck und Konzentration
- Ablaugung ohne Geometrieveränderung
- Quellen und Senken

Außerdem waren folgende Punkte zu beachten:

- Anforderungen an Hard- und Software bezüglich Effizienz und Schnelligkeit
- Erfordernis einer Schnittstelle zu Radionuklidtransportrechnungen
- Notwendigkeit von Prä- und Postprozessoren
- Verifizierung
- Dokumentation
- Verfügbarkeit und Weiterentwicklungspotential.

Aufbauend auf dem schnellen Grundwasserprogramm sollte es durch spätere Programmerweiterungen außerdem möglich sein, Ausbreitungsrechnungen für ideale Tracer zur Bestimmung von Transportwegen und Laufzeiten durchzuführen. Weiterhin könnten sol-

che Transportrechnungen auf Radionuklide, unter Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls (Zerfallsketten) und der Adsorption (Henry-Isotherme), und unter Umständen sogar auf Mehrphasenströmungen ausgedehnt werden.

3 Organisation und Management der Softwareentwicklung

Das Rechenprogramm d^3f (**d**istributed **d**ensity **d**riven **f**low) wurde von einer Arbeitsgruppe aus Mitarbeitern verschiedener Hochschulinstitute entwickelt. Ihr gehörten folgende Personen an:

Institution:	Institut für Hydromechanik und Wasserwirtschaft ETH-Hönggerberg CH-8093 Zürich
Verantwortlicher Leiter:	Prof. Dr. Wolfgang Kinzelbach
Mitarbeiter:	Sascha Oswald, Carsten Schwarz
Vorhaben:	Physikalischen Grundlagen, Modellierung, Dokumentation

Institution:	Institut für Angewandte Mathematik Universität Erlangen-Nürnberg Martensstraße 3 D-91058 Erlangen
Verantwortlicher Leiter:	Prof. Dr. Peter Knabner
Mitarbeiter	Peter rolkovič, Christoph Tapp, Kathrin Thiele
Vorhaben:	Gittergenerierung, Diskretisierungsverfahren, Fehlerschätzer, Dokumentation

Institution:	Institut für Angewandte Mathematik Universität Freiburg Hermann-Herder-Straße 10 D-79104 Freiburg
in Zusammenarbeit mit	
	Institut für Angewandte Mathematik Universität Bonn Wegelerstraße 6 D-53115 Bonn
Verantwortliche Leiter:	Prof. Dr. Dietmar Kröner / Prof. Dr. Martin Rumpf

Mitarbeiter:	Joachim Becker, David Bürkle, Martin Metscher, Ralf Neubauer, Mario Ohlberger, Susanne Reck, Monika Wierse
Vorhaben:	Graphisches Postprocessing, Dokumentation
Institution:	Institut für Computeranwendungen 3 Universität Stuttgart Pfaffenwaldring 27 D-70569 Stuttgart
Verantwortlicher Leiter:	Prof. Dr. Gabriel Wittum
Mitarbeiter:	Gabriele Beddies, Klaus Birken, Dirk Feuchter, Klaus Johannsen, Stefan Lang, George Mazurkevich, Henrik Rentz-Reichert
Vorhaben:	Graphische Benutzeroberfläche, effiziente Lösungsalgorithmen, Parallelisierung, Dokumentation
Institution:	Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen Universität Hannover Appelstraße 9A D-30167 Hannover
Verantwortlicher Leiter:	Prof. Dr. Werner Zielke
Mitarbeiter:	Udo Jüttner, Harald Kasper, Thomas Rother
Vorhaben:	Erstellung eines hydrogeologischen Strukturmodells, Dokumentation

Die technische Leitung und die Koordination der Zusammenarbeit zwischen den einzelnen Hochschulen wurde von Klaus Johannsen, Universität Stuttgart, wahrgenommen.

4 Physikalisches Modell und mathematische Beschreibung

Die Gleichungen, die zur Modellierung von dichteabhängigen Grundwasserströmungen verwendet wurden, waren zu Projektbeginn schon weitgehend bekannt und im Rahmen des fachlichen Feinkonzeptes [47] festgelegt. Nichtdestoweniger bestand die Notwendigkeit, den gegebenen Satz von partiellen Differentialgleichungen auf seine physikalische Richtigkeit zu überprüfen und ihn gleichzeitig durch einen Satz von physikalisch sinnvollen und notwendigen Anfangs- und Randbedingungen zu vervollständigen. Gleichzeitig wurden sie durch erweiterte Dispersionsansätze abgerundet.

Die Dichteströmung wird durch zwei Erhaltungsgleichungen für die Gesamtmasse und für die Salzmasse beschrieben. Zusätzlich wird angenommen, daß die Fluidgeschwindigkeiten dem Darcyschen Gesetz genügen. Als Primärvariablen dienen der Druck p und der relative Salzmassenbruch c. Im Gegensatz zu anderen Autoren, wie z.B. [66], [75] und [91], wird auf die Verwendung der Oberbeck-Boussinesq-Approximation verzichtet. Bei dieser Näherung, die zu einer erheblichen Vereinfachung der Differentialgleichungen führt, werden alle Dichteänderungen bis auf die in dem Auftriebsterm $\rho \boldsymbol{g}$ in der Darcy-Gleichung (4.5) vernachlässigt. Diese Approximation ist aber nur für geringe Konzentrationen anwendbar [97].

Von besonderer Bedeutung ist die Angabe der Konzentration. Sie wird als relativer Massenbruch für Salz angegeben:

$$c_{rel} = \frac{c_{abs}}{c_{abs,\,max}} \qquad \text{mit} \qquad c_{abs} = \frac{m_{Salz}}{m_{Salz} + m_{H_2O}} \tag{4.1}$$

Hierbei sind die Konzentrationen auf der rechten Seite der Gleichung absolute Massenbrüche. Im folgenden repräsentiert das Symbol c stets den relativen Massenbruch c_{rel}. Das Maximum der Konzentration kann entweder der Massenbruch gesättigter Salzlauge oder aber der im konkreten Problem auftretende maximale Massenbruch sein. Konsistent dazu wird die maximale Dichte, die zu dieser maximalen Konzentration gehört, bei Refe-

renztemperatur angegeben. In diesem Modell wird der Einfluß der Temperatur auf die Sättigungkonzentration vernachlässigt. Es werden also Effekte wie z.B. Nachlösung nicht berücksichtigt.

Der Zusammenhang der Konzentrationsangabe als Massenbruch c_{abs} mit der Angabe als Masse pro Volumen c_{Vol} ist durch

$$c_{Vol} = c_{abs} \cdot \rho$$

gegeben.

4.1 Die partiellen Differentialgleichungen

Dichteabhängige Strömungen werden durch zwei Massenerhaltungsgleichungen beschrieben, von denen die eine die Erhaltung der Gesamtmasse und die andere die Erhaltung der Salzmasse darstellt. Mit den Bezeichnungen ϕ für die effektive Porosität, ρ für die Dichte des Fluids in Abhängigkeit von Temperatur θ und Salzmassenbruch c, s für die Massenzugabe pro Volumen (Quell- und Senkenterm) und der Zerlegung des Massenflusses in ein Produkt aus Geschwindigkeit $\boldsymbol{q}$ und Dichte läßt sich die Gesamtmassenerhaltung in der Form

$$\partial_t(\phi\rho) + \nabla \cdot (\boldsymbol{q}\rho) = s \qquad (4.2)$$

schreiben. Für die Salzmassenerhaltung wird angenommen, daß der Fluß von Salzmasse sich aus einem konvektiven Fluß der Salzmasse mit der oben definierten Geschwindigkeit $\boldsymbol{q}$ und einem dispersiven Fluß gemäß Fickschem Gesetz zusammensetzt. Damit wird diese Erhaltungsgleichung zu

$$\partial_t(\phi\rho c) + \nabla \cdot (\boldsymbol{q}\rho c - \rho(D + D_m)\nabla c) = s_c, \qquad (4.3)$$

wobei der Diffusions-/Dispersionskoeffizient in zwei Teile, die molekulare Diffusionskonstante D_m und den Dispersionskoeffizienten D zerlegt wurde. Dabei hängt D_m nur vom Ort, aber nicht von den Unbekannten der Differentialgleichungen ab, während D hingegen von Druck p, dem Salzmassenbruch c und deren Ableitungen abhängen kann. Üblicherweise wird der Dispersionskoeffizient mit dem Scheidegger-Ansatz

$$D_{ij} = \frac{1}{|\boldsymbol{q}|} \sum_{k,\, l} a_{ijkl} q_k q_l \qquad (4.4)$$

angesetzt, wobei der Tensor vierter Stufe a_{ijkl} sich je nach Isotropie-Eigenschaften des Mediums auf zwei oder mehr Hauptwerte vereinfachen läßt. Eine Diskussion der Werte von a_{ijkl} unter verschiedenen Isotropie-Annahmen findet sich im Unterkapitel 4.3. Bei diesem Ansatz erscheint die Abhängigkeit der Dispersion von der Konzentration und dem Druck nur indirekt über die Geschwindigkeit, manche Autoren [167], [71] nehmen noch zusätzlich eine direkte Abhängigkeit von der Konzentration an. Bei der Geschwindigkeit $\boldsymbol{q}$ wird angenommen, daß sie dem verallgemeinerten Darcy-Gesetz

$$\boldsymbol{q} = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho \boldsymbol{g}) \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} \rho &= \rho(c, \theta) \\ \mu &= \mu(c, \theta) \end{aligned} \qquad (4.5)$$

gehorcht. Dabei ist k die Permeabilität des Mediums, die nur vom Ort abhängt, μ die Viskosität, die vom Salzmassenbruch c und der Temperatur θ abhängen kann und ortsunabhängig ist. Im Laufe dieses Projektes kam es zu einer Diskussion, ob die massengemittelte Geschwindigkeit der Fluidkomponenten $\boldsymbol{q}$ mit der Darcy-Geschwindigkeit zu identifizieren sei, oder ob nicht z.B. eine volumengemittelte Geschwindigkeit dem Darcy-Gesetz gehorchen müsse [160]. Da die Darcy-Geschwindigkeit aus einer Homogenisierung der Impulserhaltung stammt (siehe z.B. [14], [68] und [69]), werden nicht Geschwindigkeiten, sondern Impulse gemittelt und diese Herleitung führt aufgrund der Konstruktion zu massengemittelten Geschwindigkeiten.

Genauso, wie das Darcy-Gesetz die Gleichungen (4.1), (4.2) und (4.3) bezüglich des Geschwindigkeitsfeldes ergänzt, sind noch die Abhängigkeiten der darin enthaltenen Koeffizienten und der anderen Koeffizienten der Gleichungen von den Unbekannten p und

c durch Materialgesetze und Zustandsgleichungen zu spezifizieren. Für die Porosität nehmen wir an, daß sie nur eine Funktion des Ortes ist. Die Dichte wurde als Funktion von Salzmassenbruch und Temperatur angesetzt. Damit wird eine Speicherung durch Kompressibilität von Matrix oder Fluid mit Koeffizient $S = \frac{1}{g}\left(\partial_p \phi + \frac{\phi}{\rho}\partial_p \rho\right)$ vernachlässigt. In den meisten Fällen ist diese Vernachlässigung möglich, da die Zeiten für den Druckausgleich deutlich kleiner sind als die Transportzeiten des Salzes. In einigen Situationen aber kann diese Vernachlässigung zu Problemen führen. Eine weitere Diskussion dieser Problematik findet sich im nächsten Unterkapitel. Das durch die Gleichungen (4.1) (4.2) und (4.3) definierte Problem kann erst eindeutig gelöst werden, wenn Anfangs- und Randbedingungen angegeben werden; die möglichen und sinnvollen Anfangs- und Randbedingungen können erst nach einer genaueren Bestimmung des Typs der Gleichungen festgelegt werden, deshalb werden diese erst im Unterkapitel 4.4 besprochen.

4.2 Der Charakter der Gleichungen

Die Gleichungen (4.1)(4.2) und (4.3) haben in den Ableitungen nach der Zeit unter den obigen Bedingungen an ρ und ϕ nur den Salzmassenbruch, aber nicht den Druck p stehen, dementsprechend gelten die Umformungen:

$$\partial_t(\phi\rho) = \phi\partial_c\rho\partial_t c \qquad (4.6)$$

$$\partial_t(\phi\rho c) = \phi(\rho + c\partial_c\rho)\partial_t c \qquad (4.7)$$

Damit ist die Linearkombination $\frac{1}{\rho}\left(\left(1 + \frac{c\partial_c\rho}{\rho}\right)(\text{GL. 4.2}) - \frac{\partial_c\rho}{\rho}(\text{GL. 4.3})\right)$ eine Gleichung ohne Zeitableitungsterm, die in Kombination mit einer beliebigen der beiden Ausgangsgleichungen (4.2) oder (4.3) und den gleichen Anfangs- und Randbedingungen wieder den gleichen Lösungsraum beschreibt. Diese zusätzliche Gleichung

$$\nabla \cdot \left(\boldsymbol{q} + (D + D_m)\frac{\nabla\rho}{\rho}\right) = \partial_{cc}\left(\frac{1}{\rho}\nabla c \cdot (D + D_m)\nabla c\right) + s_v \qquad (4.8)$$

läßt sich als Volumenerhaltungsgleichung interpretieren. Die Geschwindigkeit des Massenaustausches $\boldsymbol{q}$ wird hierbei durch eine Geschwindigkeit des Volumentransportes

$$v_v := \left(\boldsymbol{q} + (D + D_m) \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) \qquad (4.9)$$

(im weiteren kurz Volumengeschwindigkeit genannt) ersetzt. Die Quell- und Senkenterme setzen sich aus einer Volumenänderung des Fluides bei Gemischbildung durch diffusive/dispersive Prozesse und einem Volumenzugabeterm

$$s_v := \left(\frac{s}{\partial_c \rho} - \frac{s_c}{\rho + c \partial_c \rho} \right) \qquad (4.10)$$

als Linearkombination der beiden Massenquellen s und s_c zusammen. Die Gleichung (4.10) ist als Differentialgleichung für den Druck p interpretiert im allgemeinen von elliptischem Typ, die zweiten Ableitungen von p nach den Ortsvariablen kommen aber sowohl aus der Abhängigkeit der Geschwindigkeit $\boldsymbol{q}$ von ∇p, als auch aus der Abhängigkeit des Dispersionskoeffizienten D von ∇p. Durch den Anteil an zweiten Ableitungen aus dem Dispersionskoeffizienten kann die Gleichung aber – je nach gewähltem Dispersionsansatz – lokal entarten. Im weiteren wird vom allgemeinen Falle der elliptischen Differentialgleichung in p ausgegangen. Die weitere Differentialgleichung (4.2) oder (4.3), die zur Vervollständigung des Satzes an Differentialgleichungen für das System benutzt wird, ist von parabolischem Typ in der Unbekannten Salzmassenbruch c. Damit handelt es sich um ein System aus einer elliptischen Differentialgleichung im Druck p und einer parabolischen Differentialgleichung im Salzmassenbruch c. Der elliptische Charakter der Gleichung (4.8) resultiert direkt aus der Vernachlässigung von Speichertermen; der Druck stellt sich instantan in einem Gleichgewicht mit der gerade herrschenden Salzmassenverteilung ein. Ohne diese Vereinfachung würde die Gleichung (4.8) noch zusätzlich einen Druckspeicherterm $\partial_t \phi + \phi \frac{\partial_t \rho}{\rho}$ enthalten, wodurch die Differentialgleichung zu einer parabolischen Gleichung würde. Dieser zusätzliche Speicherterm ermöglicht es, daß Volumenänderungen durch Zugaben, Entnahmen oder Vermischung (s.o.) lokal aufgefangen werden. Ohne diese Speicherung muß ein entsprechender Ausgleich über den Rand

des Gebietes geschehen, was aber nicht bei allen Randbedingungen möglich ist. Dieser Unterschied spielt keine Rolle für geologische Formationen mit Längenabmessungen im Bereich mehrerer Kilometer und einer Tiefe von ein paar hundert Metern, weil die Zeit für den Druckausgleich in vertikaler Richtung bei diesen Skalen typischerweise zwischen Stunden und einigen Tagen beträgt, die Transportzeiten für das Salz aber im Zeitrahmen vieler Jahre liegen.

4.3 Der Dispersionstensor

Der Dispersionstensor D wird häufig mit dem Ansatz (4.4) ausgedrückt [14]. In der einschlägigen Literatur finden sich auch andere funktionale Zusammenhänge für den dispersiven Fluß $\boldsymbol{j}_D = -\rho D \nabla c$ in Abhängigkeit von der Druck- und Konzentrationsverteilung [71], [167]. Diese Ansätze enthalten noch eine zusätzliche Dämpfung des dispersiven Flusses bei hohen Dichtekontrasten und stabiler Schichtung. Während Welty [167] bei instabiler Schichtung von einem divergierenden Dispersionskoeffizienten spricht, verwendet Hassanizadeh [71] auch in diesen Situationen einen gedämpften Wert für den dispersiven Fluß. In dem Artikel von Jensen et al. [78] wird auf die Transformationseigenschaften des Dispersionstensors unter Drehungen des Koordinatensystems verzichtet. Dieser ist damit koordinatenabhängig. In diesem Projekt wird der Ansatz aus Gleichung (4.4) weiter verwendet. Aufgrund seines Konstruktionsprinzips hat dieser gegenüber dem Zugang von Jensen [78] den Vorteil, gegen Rotationen des Koordinatensystems invariant zu sein. Zusätzliche Dichteabhängigkeiten, wie in [167] oder auch in [71] beschrieben, werden aber vernachlässigt, da sie in bedeutendem Maße erst als makroskopische Effekte auftauchen. Durch die explizite Auflösung der Heterogenitäten des Aquifers im Modell werden diese Effekte mitberechnet. Wie schon in [14] beschrieben, ergibt sich aus der Gleichung (4.4) für isotrope Medien der häufig verwendete Dispersionstensor

$$D = |\boldsymbol{q}| \alpha_T I + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{|\boldsymbol{q}|} \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}^T , \qquad (4.11)$$

wobei $\boldsymbol{q}^T$ der transponierte Vektor zu $\boldsymbol{q}$, $|\boldsymbol{q}|$ der Betrag von $\boldsymbol{q}$ und I die Einheitsmatrix ist. Obiger Dispersionstensor hat noch zwei Freiheitsgrade: die longitudinale Dispersionslänge α_L für Dispersion in Richtung der Geschwindigkeit $\boldsymbol{q}$ und die transversale Dispersionslänge α_T für Dispersion senkrecht zur Geschwindigkeitsrichtung. Für Medien mit einer ausgezeichneten Richtung - für die weitere Herleitung sei es ohne Einschränkung der Allgemeinheit die z-Achse - und Isotropie in den auf dieser Richtung senkrecht stehenden Ebenen läßt sich der Dispersionsansatz (4.4) auf sechs Freiheitsgrade reduzieren. Die sechs Freiheitsgrade sind die longitudinale Dispersionslänge bei horizontaler Strömung

$$\alpha_{L,\,H} \;=\; a_{1111} \;=\; a_{2222}\,, \tag{4.12}$$

die transversale Dispersionslänge in horizontaler Richtung für horizontale Strömungen

$$\alpha_{TH,\,H} \;=\; a_{1122} \;=\; a_{2211}\,, \tag{4.13}$$

die transversale Dispersionslänge in vertikaler Richtung bei horizontaler Strömung

$$\alpha_{TV,\,H} \;=\; a_{3311} \;=\; a_{3322}\,, \tag{4.14}$$

die longitudinale Dispersionslänge für vertikale Strömungen

$$\alpha_{L,\,V} \;=\; a_{3333}\,, \tag{4.15}$$

die transversale Dispersionslänge bei vertikaler Strömung

$$\alpha_{TH,\,V} \;=\; a_{1133} \;=\; a_{2233}\,, \tag{4.16}$$

die in horizontaler Richtung wirkt, und schließlich ein Parameter, der die Kopplungsstärke des Dispersionsellipsoids an die Strömungsrichtung mit der Kopplung an die Ausrichtung des Mediums vergleicht:

$$\alpha_C \;=\; a_{1313} \;=\; a_{2323} \;=\; a_{3131} \;=\; a_{3232}\,. \tag{4.17}$$

Die nichtgenannten Einträge von a_{ijkl} verschwinden mit Ausnahme von

$$a_{1212} = a_{2121} = \frac{1}{2}(\alpha_{L,H} - \alpha_{TH,H}). \qquad (4.18)$$

Bei der zusätzlichen Bedingung von Bear ([14]; Seiten 605 ff) wird $\alpha_{TH,V} = \alpha_{TV,H}$, d.h. die transversale Dispersionslänge in horizontaler Richtung bei vertikaler Strömung stimmt mit der transversalen Dispersionslänge in vertikaler Richtung bei horizontaler Strömung überein. Aus obiger Interpretation von $\alpha_{TH,V}$ und $\alpha_{TV,H}$ und den Arbeiten von Bear [14] ist kein Grund für die von ihm angenommene Übereinstimmung ersichtlich. In [13] zeigt Bear die Gültigkeit der Annahme $a_{ijkl} = a_{klij}$ nur für isotrope Medien.

Der Ansatz von Jensen et al. [78]

$$D_{11} = \alpha_{LH}\frac{q_1 q_1}{q} + \alpha_{TH}\frac{q_2 q_2}{q} + \alpha_{TV}\frac{q_3 q_3}{q}$$

$$D_{22} = \alpha_{TH}\frac{q_1 q_1}{q} + \alpha_{LH}\frac{q_2 q_2}{q} + \alpha_{TV}\frac{q_3 q_3}{q}$$

$$D_{33} = \alpha_{TV}\frac{q_1 q_1}{q} + \alpha_{TV}\frac{q_2 q_2}{q} + \alpha_{LV}\frac{q_3 q_3}{q}$$

läßt sich nicht auf das Modell (4.4), (4.12) - (4.18) zurückführen. Obwohl die Isotropieannahmen an das Medium mit der z-Achse als ausgezeichneter Richtung die gleichen sind, ist die von Jensen vorgenommene Vernachlässigung der Nichtdiagonalelemente mit einem rotationsinvarianten Dispersionsansatz nicht vereinbar. Nur für Strömungen in Richtung einer der Koordinatenachsen ist Jensens Modell eine Vereinfachung des Modells (4.4), (4.12) - (4.18), wobei der Korrelationsparameter α_C in diesen Fällen keine Rolle spielt und die transversal-horizontale Dispersionslänge bei vertikaler Strömung gleich der transversal-vertikalen Dispersionslänge gesetzt ist. Für nicht-achsparallele Strömungen geht der Ansatz von Jensen auch mit den Nebenbedingungen $\alpha_{TV} = \alpha_{TH}$ und $\alpha_{LV} = \alpha_{LH}$ nicht in den üblichen Scheideggerschen Ansatz (4.11) über.

Eine weitere Version eines Dispersionstensors für ein Medium mit einer ausgezeichneten Richtung findet sich bei Burnett, Frind [29]. Diese Autoren gehen wiederum von der ausgezeichneten z-Achse aus und ergänzten das Modell des isotropen Mediums (4.11) durch eine Unterscheidung der transversalen Dispersionslänge nach vertikal-transversaler Dispersion und horizontal-transversaler Dispersion

$$D_{11} = \alpha_L \frac{q_1 q_1}{q} + \alpha_{TH} \frac{q_2 q_2}{q} + \alpha_{TV} \frac{q_3 q_3}{q}$$

$$D_{22} = \alpha_{TH} \frac{q_1 q_1}{q} + \alpha_L \frac{q_2 q_2}{q} + \alpha_{TV} \frac{q_3 q_3}{q}$$

$$D_{33} = \alpha_{TV} \frac{q_1 q_1}{q} + \alpha_{TV} \frac{q_2 q_2}{q} + \alpha_L \frac{q_3 q_3}{q}$$

$$D_{12} = D_{21} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{q_1 q_2}{q}$$

$$D_{13} = D_{31} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{q_1 q_3}{q}$$

$$D_{23} = D_{32} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{q_2 q_3}{q}$$

Dieses Modell ist ein Spezialfall von (4.4), (4.12) - (4.18), wobei die longitudinalen Dispersionslängen miteinander und die transversal-horizontale Dispersionslänge bei vertikaler Strömung mit der transversal-vertikalen Dispersionslänge identifiziert werden und die Kopplungsstärke sich aus den anderen Freiheitsgraden errechnet: α_c = 1/2 (α_L - α_{TV}). Die Modelle [71] und [167] lassen sich wegen der zusätzlichen Abhängigkeit von der Konzentration bzw. dem Dichtegradienten nicht auf den Ansatz (4.4) zurückführen. Vom Ansatzpunkt her erweitern sie das einfache Modell (4.11) durch zusätzliche Dämpfung bei großen Dichtekontrasten, wobei diese Modelle entweder nur für stabile Schichtungen gelten [167] oder nur für diese mit Experimenten belegt werden [70]. In diesem Projekt wird im allgemeinen der Dispersionstensor für isotrope Medien aus Gleichung (4.11) verwendet, aber auch der Tensor (4.4), (4.12) - (4.18) ist im Programm d^{3}f implementiert, wobei eine durch die Eulerwinkel gegebene Drehung die *z*-Achse auf die Normalenrichtung der Isotropieebene abbildet. Dichteabhängige effektive Dispersivitä-

ten gemäß [167] sind im Programm nicht implementiert, da die Struktur des Mediums zumindest ab einer bestimmten Größenskala aufgelöst werden soll und damit von dieser Skala an keine makroskopischen, effektiven Parameter gebraucht werden.

4.4 Anfangs- und Randbedingungen

Ein gekoppeltes System aus einer elliptischen und einer parabolischen Differentialgleichung benötigt im allgemeinen zur eindeutigen Lösbarkeit eine Anfangsbedingung - die zweite Unbekannte ergibt sich dann aus der elliptischen Differentialgleichung und aus dieser Anfangsbedingung - und für jede Gleichung eine Randbedingung für jeden Randpunkt. Diese Randbedingungen können den Wert einer Variablen, die sogenannte Dirichlet-Randbedingung, oder den Fluß über den Rand - auch in Abhängigkeit von der Lösung auf dem Rand - festlegen. Die zweite Randbedingung heißt Neumann-Randbedingung, wenn der Fluß unabhängig von der Lösung auf dem Rand angegeben wird und Cauchy-Randbedingung, wenn eine Linearkombination aus Fluß und Randwert gegeben ist. Bei den Flußrandbedingungen sind aber auch deutlich kompliziertere Abhängigkeiten von den Randwerten möglich.

4.4.1 Anfangsbedingungen

Bei dem System partieller Differentialgleichungen (4.2) und (4.3) handelt es sich um ein gekoppeltes System, das im allgemeinen den Charakter einer elliptischen Differentialgleichung in p und einer parabolischen Differentialgleichung in c hat (vgl. Unterkapitel 4.2). Dementsprechend muß für den Salzmassenbruch c eine Anfangsverteilung c_0 angegeben werden, woraus sich der Anfangsdruck p_0 gemäß Volumenerhaltung (4.8) aus den Massenerhaltungsgleichungen ergibt. Ohne Vernachlässigung des Speicherkoeffizienten müßte noch eine Anfangsbedingung für den Druck angegeben werden. Abweichungen dieser beiden Druckverteilungen voneinander würden exponentiell abgeschwächt, wobei die Zeitkonstante der Dämpfung bei vertikalen Ausdehnungen von ein paar hundert Metern typischerweise im Bereich von Stunden bis wenigen Tagen liegt. Auch wenn ein Speicherterm in den Gleichungen benutzt wird, können die Druckanfangsbedingungen nicht frei gewählt werden. Leijnse ([99]; Seite 51) bemerkt dazu: “(...), de-

finition of arbitrary initial conditions will in general lead to physically unrealistic initial velocity fields in the domain. Experience so far has shown that such a situation usually leads to numerical problems as well; very small time steps are required to suppress numerical instabilities." Er umgeht dieses Problem, indem er in einem ersten Schritt das hydrostatische Druckfeld zur Anfangskonzentrationsverteilung als Startwertverteilung für den Druck berechnet.

4.4.2 Randbedingungen

Die notwendigen Randbedingungen für das Problem (4.2) und (4.3) werden nicht auf dem ganzen Gebietsrand $\Gamma = \partial\Omega$ angegeben, sondern stückweise für einzelne Randstükke. Dafür wird der Rand in eine endliche Zahl von offenen Randstücken Γ_i, i = 1,... zerlegt, d.h.

$$\Gamma_i \bigcap \Gamma_j = \varnothing \text{ für i} \neq j \qquad (4.19)$$

$$\bigcup_i \bar{\Gamma}_i = \Gamma \qquad (4.20)$$

Für jedes Randstück Γ_i wird ein Satz von zwei Randbedingungen benötigt; eine für den Druck in der Gesamtmassenerhaltungsgleichung und eine für die Konzentration bzw. die Salzmassenerhaltung. Die Darstellung der Randbedingungen folgt im weiteren den Beschreibungen in [52] und [36]. Als erstes werden die Randbedingungen für den Druck oder, wenn Flüsse vorgegeben werden, für die Gesamtmassenerhaltung (4.2) besprochen, danach die Randbedingungen für die Konzentration bzw. die Salzmassenerhaltungsgleichung (4.3). Schließlich folgt noch eine Aufzählung von Kombinationen von Randbedingungen mit besonderer physikalischer Bedeutung, d.h. im letzten Teil dieses Unterkapitels werden schon vorher besprochene Randbedingungen in Zusammenhang mit physikalischen Situationen gebracht. Für die Flußrandbedingungen werden zur Vereinfachung die folgenden Bezeichnungen verwendet:

$$\partial_n := \rho \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q} \qquad (4.21)$$

$$\partial_n c \;:=\; \rho \boldsymbol{n} \cdot (\boldsymbol{q} c - (D + D_m)\nabla c) \qquad (4.22)$$

In diesem Projekt eingesetzte Randbedingungen für den **Druck** sind:

- Die **Dirichletbedingung** für den **Druck**

$$p(\boldsymbol{x}, t) \;=\; p_r(\boldsymbol{x}, t) \text{ für } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i \qquad (4.23)$$

Dabei wird der Druck auf dem Rand festgehalten.

- Die **Neumann**-Randbedingung für den **Massenfluß** (4.21) als Funktion von Ort und Zeit

$$\partial_n p \;=\; f_r(\boldsymbol{x}, t) \text{ für } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i \qquad (4.24)$$

- Die Normalkomponente der (massengemittelten Darcy-) **Geschwindigkeit** wird angegeben

$$\partial_n p \;=\; \rho g_r(\boldsymbol{x}, t) \text{ für } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i, \qquad (4.25)$$

wobei $g_r(\boldsymbol{x}, t)$ vorgegeben wird und ρ vom Salzmassenbruch auf dem Rand abhängt. Je nach Randbedingung für den Salzmassenbruch c kann diese Randbedingung -wie auch die folgende - von der (unbekannten) Lösung auf dem Rand abhängen.

- Die letzte Bedingung für den Gesamtmassenfluß ist die Bedingung **keines Volumenverlustes** über den Rand

$$\partial_n p \;=\; -\boldsymbol{n} \cdot (D + D_m)\nabla\rho(c) \;=\; -\rho'(c)\boldsymbol{n} \cdot (D + D_m)\nabla c$$
$$\Leftrightarrow \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{v}_v \;=\; 0 \qquad . \qquad (4.26)$$
$$\text{für } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i$$

Diese Randbedingung kann benutzt werden, um Salzeintrag an Rändern von Modellgebieten ohne Volumenänderung zu modellieren, was vor allem bei komplett abgeschlossenen Gebieten wichtig sein kann. Bemerkungen dazu finden sich im Unterkapitel 6.3.

Genauso vielfältig sind die Randbedingungen für den Salzmassenbruch bzw. den Salzmassenfluß(4.22) über den Rand:

- Auch für den **Salzmassenbruch** gibt es eine **Dirichletbedingung**

$$c(\boldsymbol{x}, t) = c_r(\boldsymbol{x}, t) \text{ für } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i, \tag{4.27}$$

die den Salzmassenbruch auf dem Randstück festhält.

- Die **Neumannbedingung** für den **Salzmassenfluß** (4.22) kennt diesen Fluß schon a-priori

$$\partial_n c = h_r(\boldsymbol{x}, t) \text{ für } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i. \tag{4.28}$$

- Eine **Ablaugungsbedingung**

$$\partial_n c = \alpha(\boldsymbol{x}, t)(c - c_r(\boldsymbol{x}, t)) \text{ für } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i, \tag{4.29}$$

die mathematisch zu einer Cauchy-Bedingung äquivalent ist. Auf dem Randstück müssen eine Ablaugungskonstante α ($\boldsymbol{x}$, t) und der Salzmassenbruch $c_r(\boldsymbol{x}, t)$ der Lauge definiert sein.

- Die Bedingung **verschwindender diffusiver/dispersiver Salzflüsse** über den Rand, die auch **Ausstromrandbedingung** genannt wird:

$$\begin{aligned} -\rho \boldsymbol{n} \cdot (D + D_m)\nabla c &= 0 \\ \Leftrightarrow \partial_n c &= \rho \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q} c \end{aligned} \quad \text{für } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i. \tag{4.30}$$

Sie stellt eine Approximation für einen Ausstromrand $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{q} > 0$ dar, bei dem weder die Konzentration am Rand noch der Fluß über denselben bekannt sind. Diese Bedingung läßt an entsprechenden Stellen die Möglichkeit, daß sich sowohl die Konzentration als auch der Salzfluß frei einstellen kann.

- Eine Randbedingung, die dynamisch in Abhängigkeit von der Richtung der Geschwindigkeit zwischen einer Dirichlet-Bedingung für den Salzmassenbruch und der Ausstromrandbedingung umschaltet. Hierbei ist

$$\begin{aligned} c(\boldsymbol{x}, t) &= c_r(\boldsymbol{x}, t) \\ \partial_n c &= \rho \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q} c \end{aligned} \qquad \text{für} \qquad \begin{cases} \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q} < 0 \\ \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q} > 0 \end{cases} \text{ und } \boldsymbol{x} \in \Gamma_i . \qquad (4.31)$$

Der Dirichlet-Wert für den Salzmassenbruch muß für das gesamte Randstück angegeben sein, auch wenn er nur in Bereichen mit Einstrom $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{q} \leq 0$ verwendet wird. Diese **implizite Randbedingung** ist nicht differenzierbar und kann sowohl numerisch als auch analytisch ungünstige Eigenschaften haben. Wenn eine Neumann-Randbedingung für den Gesamtmassenfluß oder die Geschwindigkeit über den Rand auf dem Randstück Γ_i gilt, läßt sich diese Randbedingung direkt in eine Dirichlet oder Ausstromrandbedingung überführen.

Die Ablaugungsbedingung, die Ausstromrandbedingung und natürlich die implizite Randbedingung hängen von der Lösung auf dem Rand ab. Die letzten beiden sind sogenannte nicht-lineare Randbedingungen. Im Prinzip lassen sich die Randbedingungen aus beiden Aufzählungen beliebig kombinieren, doch sind z.B. die Dirichletwerte nicht auf jedem Randstück a-priori bekannt. Deshalb ist es wichtig, den Rand des Modellgebietes physikalisch zu wählen und nach den physikalischen Eigenschaften des Randstückes ein geeignetes Paar von Randbedingungen zu wählen. Besonders häufig auftretende Situationen sind die folgenden:

- **Undurchlässige Ränder** werden durch Neumannrandbedingungen mit Flußstärke null sowohl für den Gesamtmassenfluß als auch den Salzmassenfluß repräsentiert.

- **Symmetrieachsen** können wie undurchlässige Wände mit Neumann-Null-Bedingungen realisiert werden.
- Die Bereiche, in denen der Aquifer an einen **Salzstock** grenzt, können für den Gesamtmassenfluß wie geschlossene Ränder betrachtet werden, oder als Ränder mit verschwindendem Volumenfluß über denselben. In [99] finden sich Einwände gegen die Behandlung von Salzstöcken als geschlossene Ränder für die Gesamtmasse. Für den Salzmassenbruch kann entweder die Sättigungskonzentration der Lauge als Dirichletwert vorgegeben werden oder der Ablaugungsprozeß über die Randbedingung mitmodelliert werden. Der erste Ansatz führt häufig zu nichtkompatiblen Anfangs- und Randbedingungen, so daß der Ablaugungsansatz vorzuziehen ist. Die Kritik an der Salzmassenbruch-Dirichlet-Randbedingung findet sich unter anderem auch in [90].
- **Einstrombereiche** werden unter anderem mit einem vorgegebenem Gesamtmassenfluß $f_r(\boldsymbol{x}, t)$ gemäß Gleichung (4.24) oder Geschwindigkeit $g_r(\boldsymbol{x}, t)$ gemäß Gleichung (4.25) und einer Neumann-Bedingung für den Salzfluß (4.28), wobei die Flußrate für die Salzmasse sich im ersten Falle zu $h_r(\boldsymbol{x}, t) = c_r f_r(\boldsymbol{x}, t)$ und im zweiten Falle zu $h_r(\boldsymbol{x}, t) = c_r \rho(c_r) f_r(\boldsymbol{x}, t)$ aus dem Gesamtmassenfluß beziehungsweise der Geschwindigkeit und der Konzentration im Oberstrom c_r berechnet. Hierbei wird der dispersive/diffusive Fluß über den Rand vernachlässigt. Alternativ läßt sich auch der Salzmassenbruch mit einer Dirichletbedingung mit Wert c_r auf dem Einstromrand festhalten. Dieses zweite Vorgehen stellt bei Geschwindigkeiten mit großer Komponente parallel zum Rand eine schlechte Näherung dar.
- Ränder mit **Ausstrom** sind a-priori als solche zu identifizieren, wenn wiederum entweder der Gesamtmassenfluß über den Rand (Neumann-Randbedingung) oder die Geschwindigkeit über den Rand vorgegeben ist. Eine sinnvolle Approximation für den Salzfluß ist die Vernachlässigung dispersiver/diffusiver Vermischung über denselben. Dieses wird durch die Ausstromrandbedingung für den Salzmassenfluß (4.30) realisiert. Im Gegensatz zum vorhergehenden Fall ist hierbei die Konzentration im Unterstrom nicht bekannt.
- Ränder mit **vorgegebenem Druck** können vorkommen, wenn aus einem größeren Aquifermodell ein Teilbereich ausgeschnitten wird, um diesen detaillierter zu studieren, oder aber an den Übergängen zu offenen Gewässern, innerhalb derer sich der Druck aus der Wassertiefe ergibt. Diese Ränder sollten meist mit der impliziten

Randbedingung für das Salz verknüpft werden, bei der der Randwert aus der Konzentration im Gewässer oder den Werten im größeren Modell stammt. Wenn die Strömungsrichtung über diese Ränder bekannt ist, können sie für den Salztransport auch je nach Richtung der Strömung wie die Ausstrom- bzw. Einstromränder behandelt werden.

4.5 Zustandsgleichungen und Materialeigenschaften

Die Hydrogeologie des modellierten Gebietes wird durch Dispersivitäten, Diffusionskonstanten, Permeabilitäten, Porositäten und Tortuositäten beschrieben. Diese Größen sind im allgemeinen ortsabhängig. Um eine einfachere Handhabbarkeit zu erreichen, kann das Modellgebiet in unterschiedliche hydrogeologische Einheiten zerlegt werden. Für jede dieser Einheiten müssen Dispersivität, Diffusionskonstante, Permeabilität, Porosität und Tortuosität vorgegeben werden. Im allgemeinen werden hydrogeologische Einheiten so definiert, daß die zugehörigen Parameter als konstant angenommen werden können. In diesem Falle müssen diese Werte angegeben werden. In d^3f können Permeabilitäten und Porositäten auch als einfache Funktionen des Ortes definiert werden. Dann müssen die Funktionsnamen und die zugehörigen Funktionsparameter angegeben werden.

Die Salzlauge wird durch zwei Materialgesetze beschrieben: die Dichte ρ sowie die dynamische Viskosität μ hängen von der Konzentration c (Massenbruch) des Salzes und von der Temperatur θ ab (siehe Gleichungen (4.1)). Diese Funktionen sind nicht explizit orts- und druckabhängig. Hier werden die Parameter für NaCl-Lösungen in Wasser unter atmosphärischem Druck bei einer Temperatur von 20°C angegeben.

Die Temperatur

In d^3f wird keine Energietransport berechnet. Um aber dennoch den Einfluß der Temperatur näherungsweise zu berücksichtigen, kann ein räumlich und zeitlich veränderliches Temperaturfeld vorgegeben werden. Da die Zustandsgleichungen für Dichte und dynamische Viskosität von der Temperatur abhängen, geht die lokale Temperatur in diese Größen ein. Die Temperatur kann als globale Konstante oder als globale Funktion oder

aber für jede hydrogeologische Einheit als Konstante oder Funktion angegeben werden. Es kann auch eine zeitliche Veränderung der Temperatur vorgegeben werden. Dazu wird für bestimmte Zeitintervalle ein jeweils zeitlich konstantes Temperaturfeld definiert.

4.5.1 Die Dichte

Unter der Annahme, daß Dichteänderungen in Folge von Konzentrations- oder Temperaturänderungen unabhängig voneinander sind, kann die Dichte durch einen Separationsansatz

$$\rho(c, \theta) = \rho_0 \cdot \rho_c^*(c) \cdot \rho_\theta^*(\theta) \qquad (4.32)$$

approximiert werden. Es ist dem Benutzer freigestellt, für seine Belange adäquate relative Dichtefunktionen

$$\rho_c^*(c) = \frac{\rho(c, \theta = \theta_0)}{\rho_0} \quad \text{und} \quad \rho_\theta^*(\theta) = \frac{\rho(c = c_0, \theta)}{\rho_0} \qquad (4.33)$$

zu definieren. Dabei entspricht die Dichte ρ_0 der Konzentration $c = 0$ (Frischwasser) und der Referenztemperatur $\theta_0 = 20°C$. Für reine NaCl-Lauge gilt:

$\rho_0 = \rho(c = 0, \theta = 20°C) = 998{,}2\ kg \cdot m^{-3}$

und

$\rho_{max} = \rho(c = 1, \theta = 20°C) = 1197{,}2\ kg \cdot m^{-3}$

für gesättigte NaCl-Lauge bei der Konzentration $c_{abs,max} = 0{,}26$ und $\theta_0 = 20°C$.

Abhängigkeit von der Konzentration

Für die relative Dichtefunktion ρ_c^* sind folgende Funktionen in d^3f implementiert:

1. konstante Dichte:

$$\rho_c^*(c) = 1 \qquad (4.34)$$

2. Lineare Dichte

$$\rho_c^*(c) = 1 + \gamma_p \cdot c, \qquad \text{mit } \gamma_p = \frac{\rho_{max} - \rho_0}{\rho_0} \qquad (4.35)$$

3. Reale Dichte

$$\rho_c^*(c) = \left(\frac{\rho_{max}}{\rho_0}\right)^c = e^{\gamma'_p c}, \qquad \text{mit } \gamma'_p = 0.7 \qquad (4.36)$$

Diese Funktion beschreibt die experimentellen Daten am besten [74], [100].

4. Ideale Dichte

$$\rho_c^*(c) = \left(1 + \frac{c}{c_{max}}\left(\frac{\rho_0}{\rho_{max}} - 1\right)\right)^{-1} \quad \text{oder} \quad \frac{1}{\rho_c^*(c)} = (1 - c) + \frac{c}{\rho_{max} / \rho_0} \qquad (4.37)$$

Abhängigkeit von der Temperatur

Die Auswirkungen von Temperaturänderungen auf die Dichte sind wesentlich kleiner als die von Konzentrationsänderungen. Es wird angenommen, daß der Temperaturbereich von 0°C bis 100°C reicht. Folgende Funktionen sind für die relative Dichte ρ_θ^* implementiert:

1. Konstante Dichte

$$\rho_\theta^*(\theta) = 1 \qquad (4.38)$$

2. Reale Dichte

$$\rho_\theta^* = \frac{999,79}{998,2} \cdot [1 + (\theta - 4)^2 \cdot \cdot (-6,562 \cdot 10^{-6} + 2,166 \cdot 10^{-8} \cdot (\theta - 4))] \qquad (4.39)$$

4.5.2 Die Viskosität

Für die dynamische Viskosität in Abhängigkeit von Konzentration und Temperatur wird ebenfalls ein Separationsansatz benutzt:

$$\mu(c, \theta) = \mu_0 \cdot \mu_c^*(c) \cdot \mu_\theta^*(\theta) \qquad (4.40)$$

Analog müssen relative Viskositäten in Abhängigkeit von Konzentration und Temperatur vorgegeben werden:

$$\mu_c^*(c) = \frac{\mu(c, \theta = \theta_0)}{\mu_0} \quad \text{und} \quad \mu_\theta^*(\theta) = \frac{\mu(c = c_0, \theta)}{\mu_0} \qquad (4.41)$$

Hierbei entspricht μ_0 der Konzentration c = 0 und der Referenztemperatur θ_0 = 20°C. Dieses ist die Frischwasserviskosität

$$\mu_0 \;=\; \mu(c=0,\ \theta = 20\,^{\circ}\mathrm{C}) \;=\; 1{,}002 \times 10^{-3}\ \mathrm{kg\,m^{-1}s^{-1}}$$

Der Wert der maximalen Viskosität μ_{max} bei der maximalen Konzentration $c_{abs,max}$=0,26 und bei θ_0 = 20°C beträgt:

$$\mu_{max} \;=\; \mu(c=1,\ \theta = 20\,^{\circ}\mathrm{C}) \;=\; 1{,}990 \times 10^{-3}\ \mathrm{kg\,m^{-1}s^{-1}}$$

Abhängigkeit von der Konzentration

Für die relative Viskosität μ_c* sind folgende Funktionen implementiert:

1. Konstante Viskosität

$$\mu_c^*(c) \;=\; 1 \qquad (4.42)$$

2. Lineare Viskosität

$$\mu_c^*(c) \;=\; 1 + \gamma_\mu \cdot c, \qquad \text{mit } \gamma_\mu \;=\; \frac{\mu_{max} - \mu_0}{\mu_0} \qquad (4.43)$$

3. Reale Viskosität

$$\mu_c^*(c) \;=\; 1 + 1{,}85 \cdot c \cdot c_{abs,\,max} - 4{,}1 \cdot (c \cdot c_{abs,\,max})^2 \cdot \\ \cdot\ 44{,}5 \cdot (c \cdot c_{abs,\,max})^3 \qquad (4.44)$$

Diese Relation beschreibt die Messungen an NaCl-Lauge bei 20°C am besten [101].

Abhängigkeit von der Temperatur

Die relativen Viskositätsfunktionen in Abhängigkeit von der Temperatur sind folgendermaßen implementiert:

1. Konstante Viskosität

$$\mu_\theta^*(\theta) = 1 \qquad (4.45)$$

2. Reale Viskosität

$$\mu_\theta^*(\theta) = \frac{1,7585}{1,002} \cdot \exp((-3,073 \cdot 10^{-2} + 1,303 \cdot 10^{-4} \cdot \theta) \cdot \theta^4) \qquad (4.46)$$

4.5.3 Die Hydrogeologischen Parameter

Die Permeabilität

Die Permeabilität wird für jede hydrogeologische Einheit angegeben. Sie ist ein symmetrischer Tensor zweiter Stufe. In d^{3}f sind folgende Standardangaben implementiert:

- Für ein isotropes Medium ist die Permeabilität eine skalare Größe, die konstant oder eine Ortsfunktion sein kann.
- Zur Beschreibung von kleinskaligen Heterogenitäten, die nicht explizit modelliert werden, kann die Permeabilität der entsprechenden hydrogeologischen Einheit stochastisch beschrieben werden (siehe Unterkapitel 5.3.6). In diesem Fall wird der Typ der Verteilungsfunktion sowie die Korrelationsfunktionen mit den jeweils zugehörigen Parametern vorgegeben. Zur Zeit sind folgende Möglichkeiten in d^{3}f enthalten:
  - Verteilungsfunktionen für die Permeabilität:
    Normal- oder Lognormal-Verteilung mit Mittelwert und Varianz als Parameter
  - Korrelationsfunktion:
    Normal- oder Exponentialverteilung jeweils isotrop oder anisotrop mit einer bzw. drei Korrelationslängen.

Die Permeabilitätsverteilung wird dann auf einem äquidistanten Gitter mit Hilfe einer Cholesky-Zerlegung der fouriertransformierten Autokorrelationsmatrix [129] bestimmt. Im Falle anisotroper Korrelation wird dieses Gitter um die Eulerwinkel rotiert.

- Für anisotrope Medien wird der Permeabilitätstensor durch seine drei Eigenwerte und die drei Eulerwinkel, welche die Rotation vom Hauptachsensystem der Permeabilität in das Koordinatensystem des Modells beschreiben, bestimmt. Sowohl die Eigenfunktionen als auch die Eulerwinkel können Konstante oder Ortsfunktionen sein.

Die Porosität

Hiermit ist die effektive Porosität, also diejenige die der Strömung zugänglich ist, gemeint. Sie wird für jede hydrogeologische Einheit gesondert angegeben und kann ebenfalls konstant oder eine Ortsfunktion sein.

Die Diffusion

Die Diffusionskonstante im porösen Medium wird als Produkt aus freier molekularer Diffusionskonstante mit Porosität ϕ und Tortuosität T_0 angenommen.

$$D_m = D_{m0} \phi T_0 \qquad (4.47)$$

Es wird dabei davon ausgegangen, daß die freie Diffusion in jeder hydrogeologischen Einheit als konstant angesehen werden kann. Im allgemeinen ist die Tortuosität ein Tensor zweiter Stufe, um anisotrope Diffusion beschreiben zu können. Obwohl die in d^{3}f verwendete Diskretisierung dieses zuließe, wird nur isotrope Diffusion behandelt. T_0 kann konstant oder eine einfache Ortsfunktion sein.

Die Gravitation

Der Gravitationsvektor zeigt in der Voreinstellung in die negative z-Richtung und hat den Wert 9,81 ms^{-2}. Der Benutzer kann auch mit einem gedrehten Koordinatensystem arbeiten. Dazu müssen die entsprechenden Komponenten des Gravitationsvektors angegeben werden.

5 Das Programmsystem d^3f

Das entwickelte Programmpaket d^3f besteht aus drei eigenständigen Programmen, dem Präprozessor, dem Simulator auf der Basis des Programmpakets UG und dem Postprozessor, basierend auf dem Programmpaket GRAPE.

5.1 Die Programm-Schnittstellen

Innerhalb des Programmpakets d^3f existieren zwischen den einzelnen eigenständigen Programmen wohldefinierte Schnittstellen.

5.1.1 Präprozessor - Simulator

Die Konfigurationsdateien zur Beschreibung der geophysikalischen Daten und des geophysikalischen Modells werden vom Präprozessor erstellt und in das File-System-Environment (FSE) des Modellproblems geschrieben. Sie werden mittels eines Parsers vom Simulator eingelesen, und entsprechende Listen zur Beschreibung der Koeffizientenfunktionen und Randbedingungen werden gefüllt. Die Schnittstelle zwischen dem Präprozessor und dem Simulator wurde dabei so konzipiert, daß der Präprozessor zum Schreiben der Konfigurationsdateien auf das gleiche File-System zugreift wie der Simulator zum Einlesen der Dateien. Dies gewährleistet, daß einheitliche Dateiformate verwendet werden, und ermöglicht eine einfache Wartung.

5.1.2 Simulator - Postprozessor

Die Schnittstelle zwischen dem Simulator und dem Postprozessor beruht auf Daten- und Mehrgitterfiles. Diese werden vom Simulator in einem für den Postprozessor lesbaren File-Format herausgeschrieben. Das hierbei benutzte Datenformat ist speicherplatzsparend und ermöglicht eine maschinenunabhängige Übergabe der Daten.

5.2 Der Präprozessor

Der Präprozessor ist ein interaktives Werkzeug, mit dem alle Modelldaten, die für eine Simulation benötigt werden, erzeugt oder editiert werden können. Seine Inhalte und Aufgaben zur Erstellung eines hydrogeologischen Modells (HGM) [85] wurden in einem Anforderungskatalog [48] festgelegt. Schwerpunkte waren der Aufbau und die Bearbeitung eines geometrischen Modells als Eingangsgröße für den Grobgittergenerator des Simulators und die Erstellung einer interaktiven Benutzeroberfläche zur Erstellung und Bearbeitung eines solchen Geometriemodells und zur Eingabe und Bearbeitung aller weiteren Eingabedaten: hydrogeologische Parameter, Anfangs- und Randbedingungen sowie Quellen und Senken.

Folgende Arbeiten wurden durchgeführt:

- Entwicklung von Datenstrukturen für die geometrische Modellierung
- Entwicklung eines Konverters zum Einlesen von Tiefenlinien- bzw. Querschnittsplänen im dxf-Format
- Analyse der Vertikalschnitte, basierend auf Polylinien
- Analyse der Tiefenlinienpläne mittels der Quadtree-Technik
- Entwicklung einer Methode zur Vektorisierung (zur Randerkennung von Tiefenlinienplänen)
- Erweiterung des Algorithmus zur Triangulation hinsichtlich der Erhaltung von Strukturlinien im Gebietsinneren (constrained Delaunay)
- Entwicklung von Werkzeugen zum Auffinden und Korrigieren von Inkonsistenzen
- Implementierung von Methoden zur Anbindung benachbarter Schichten
- Integration sämtlicher Funktionen in GRAPE
- Schnittstellen für den Simulator und den Postprozessor
- Programmierung der graphischen Benutzeroberfläche in GRAPE

Um eine interaktive Erstellung und Bearbeitung des HGM zu ermöglichen, wurden die entwickelten Methoden innerhalb der graphischen Programmierumgebung GRAPE implementiert. Eine detaillierte Beschreibung der Methoden befindet sich im Benutzerhandbuch [36].

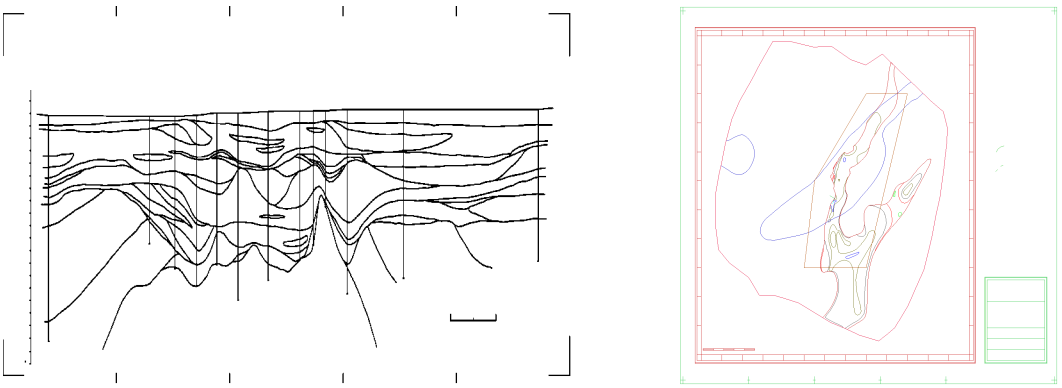
Aufgrund der vorliegenden Möglichkeiten zur Gittergenerierung und der angestrebten Advancing-Front-Methode zur Grobgittergenerierung wurde ein Randbeschreibungsmodell für die geometrische Modellbeschreibung entwickelt. Dabei wird das zu modellierende Gebiet (Domain) in mehrere Teilgebiete (Subdomains) unterteilt. Diese werden durch ihre Ränder (Boundaries) beschrieben. Im Falle zweidimensionaler Modelle bestehen die Boundaries aus Polygonzügen, im dreidimensionalen Fall aus Dreiecksnetzen. Neben der geometrischen Beschreibung können mit den entwickelten HGM-Strukturen auch topologische Informationen, beispielsweise Materialeigenschaften, verwaltet werden.

5.2.1 Basisdaten

Die Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) hat zu Beginn der Projektlaufzeit zwei Datensätze [135] als Testfälle für zu erstellende Geometriemodelle zur Verfügung gestellt. Beide Datensätze beschreiben die Untersuchungsgebiete im dxf-Format. Im 2D-Fall wird ein Gebiet in Form eines Vertikalschnittes und im 3D-Fall in Form von mehreren Tiefenlinienplänen und des Planes der Geländeoberkante dargestellt. Solche Dateien können z.B. mit AutoCAD erzeugt werden. Um eine möglichst einfache und fehlerfreie Konvertierung der Daten zu gewährleisten, sind bei der Erstellung die in [84] beschriebenen Vorgaben einzuhalten.

Unter einem Vertikalschnitt versteht man die Darstellung der Schichtenabfolge auf einer vertikalen Fläche (siehe Abb. 5.1). Die Vertikalschnitte enthalten Polygonzüge, die die Grenzen zwischen benachbarten hydrogeologischen Einheiten beschreiben. Neben den geometrischen Informationen sind z.B. Bohrlochlokationen und Legenden in den Dateien enthalten. Für die Modellierung müssen die für die geometrische Beschreibung relevanten Informationen herausgefiltert und analysiert werden.

Im dreidimensionalen Raum werden die Grenzen benachbarter hydrogeologischer Einheiten durch Flächen beschrieben, deren Beschreibungen i.a. in Form von Tiefenlinienplänen vorliegen (siehe Abb. 5.1).



bb. 5.1: Vertikalschnitt und Tiefenlinienplan

5.2.2 Datenaufbereitung

Mit dem entwickelten Filter dxf2msh [82] werden die geometrischen Informationen aus den dxf-Dateien automatisch in ein für den Präprozessor lesbares Format konvertiert. Für die Darstellung der Tiefenlinien und allgemein der geometrischen Informationen in Auto-CAD dürfen ausschließlich die Zeichnungselemente “Linie”, “Polylinie” und “3D-Polylinie” bzw. “Polylinie mit einer Erhebung” verwendet werden (siehe [84]). Beim Konvertieren der geometrischen Information können Tiefenwerte wie folgt zugeordnet werden:

- Ist ein Tiefenwert in einem Zeichnungselement explizit als z-Wert oder Erhebung enthalten, kann er verwendet werden.
- Ist kein Tiefenwert im Zeichnungselement enthalten, kann der Name des Layers ausgewertet und der in ihm enthaltenen Tiefenwert verwendet werden.

Desweiteren werden allen geometrischen Informationen innerhalb eines Layers unterschiedlichen Geometriegruppen zugeordnet.

Zur Analyse, Bereinigung und Filterung der Basisdaten wurden verschiedene Methoden entwickelt.

5.2.2.1 Analyse von Vertikalschnitten

Die Darstellung von Vertikalschnitten basiert auf Linien bzw. Polygonzügen. Der Simulator des Programmpaketes d^3f verlangt als geometrisches Modell eine Eingabedatei “geometry”, in der ein Domain durch mehrere Subdomains beschrieben wird. Diese werden durch berandende Polygonzüge (Boundaries) definiert. Jede Boundary im Inneren des Gebietes wird daher zur Beschreibung von genau zwei Subdomains verwendet. Für eine konsistente Beschreibung des Modells muß gewährleistet sein, daß

- keine doppelten Punkte und Linien,
- keine sich schneidenden Linien und
- keine im Gebiet endenden Linien

auftreten. Die zur Erzeugung einer solchen Datei notwendigen Methoden stehen zur Verfügung und werden in [82] ausführlich beschrieben.

Im allgemeinen müssen die zur Verfügung stehenden Daten ausgedünnt werden, um zu sinnvollen Knotenzahlen zu gelangen. Dieses ist bereits während der Konvertierung mit Hilfe des Douglas & Peucker Algorithmus [159] möglich. Mit diesem Algorithmus lassen sich Polygonzüge in der Form vergröbern, daß in Abhängigkeit einer Schranke ε nur die signifikanten Punkte für die Beschreibung des Polygonzuges ausgewählt werden (siehe Abb. 5.2). So kann z.B. eine gerader Polygonzug nur durch seine beiden Endpunkte beschrieben werden. Dem Benutzer wird automatisch ein Wert ε angeboten, mit dem sich eine ca. 50%ige Ausdünnung der Daten ergäbe. Da die erzielten Ergebnisse sehr stark von den ursprünglichen Polygonzügen abhängen, ist die direkte Anwendung bei der Konvertierung nicht zu empfehlen. In ungünstigen Fällen kann es zu degenerierten Strukturen kommen, z.B. wenn flache Linsen aufgrund eines zu großen ε-Wertes nur durch eine Linie approximiert werden.

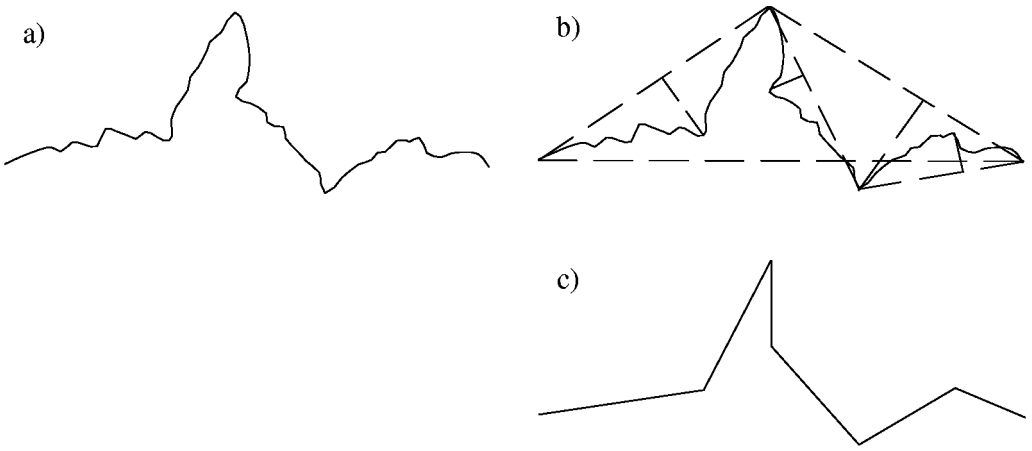


Abb. 5.2: Der Douglas-Peucker Algorithmus

5.2.2.2 Analyse von Tiefenlinienplänen

Tiefenlinienpläne beschreiben Grenzflächen benachbarter hydrogeologischer Einheiten. Innerhalb der HGM-Strukturen werden diese Flächen in Form von Dreiecksnetzen beschrieben. Das Ziel der Analyse ist die Generierung einer geeigneten Datenbasis für eine nachfolgende Triangulierung der Fläche. Hierfür wird ein vorhandener, auf dem Delaunay-Kriterium [147] basierender, Netzgenerator verwendet [154], [155]. Für die Triangulierung nicht konvexer Gebiete muß ein geschlossenes Randpolygon vorhanden sein, zur Approximation der vertikalen Ausdehnung entsprechende Stützpunkte innerhalb der Gebietsberandung [169]. Aus den Erfahrungen mit den zur Verfügung stehenden Datensätzen ergaben sich folgende Anforderungen:

- Ermittlung geschlossener Randpolygone
- Randhöhenschätzung
- Ermittlung eines Stützpunktfeldes innerhalb der Gebietsgrenzen
- Generalisierung der Ausgangsdaten

Für die Bearbeitung dieser Anforderungen wurden Methoden basierend auf einer Quadtree-Repräsentation der Tiefenlinienpläne entwickelt [130]. Der Quadtree ist ein Algorithmus, der auf einer rasterförmigen hierarchischen Datenstruktur (siehe Abbildung 5.3 a) und b)) beruht. Die Größe der einzelnen Zellen geben den Grad der Generalisierung eines Objektes an.

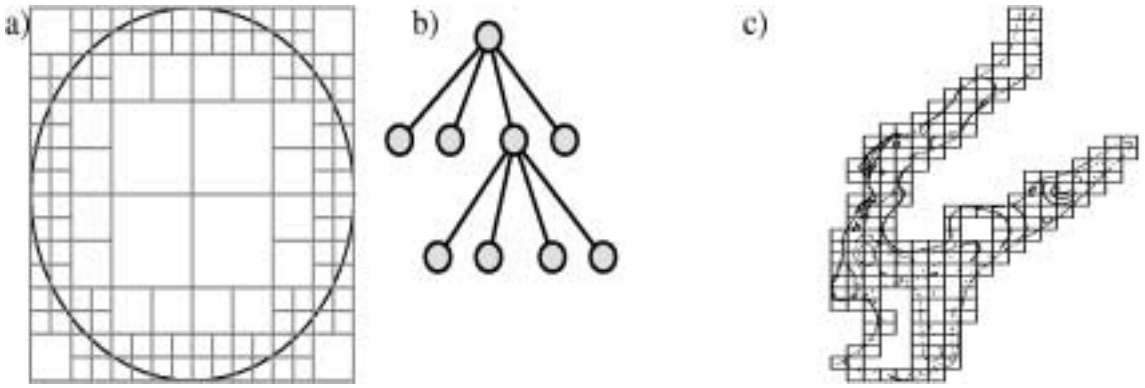


Abb. 5.3: Hierarchische Datenstruktur der Quadtree-Repräsentation

Hier werden die Stützpunkte der Isolinien und der Randpolygone innerhalb der Tiefenlinienpläne zur Initialisierung des Quadtree verwendet. Dazu werden alle Stützpunkte in ein Einheitsquadrat transformiert und durch rekursive Unterteilung in kleinere Quadrate aufgeteilt. Mit unterschiedlichen Abbruchkriterien für die Unterteilung ist eine gezielte Steuerung der Generalisierung möglich. Die nicht mehr verfeinerten Quadrate des Quadtree werden als Blätter bezeichnet. Die Blätter sind die Träger der Informationen, hier enthalten sie die Stützpunkte. In Abbildung 5.3 c) ist ein Tiefenlinienplan, der mit Hilfe der Quadtree-Methode analysiert wurde, dargestellt.

Zur Ermittlung geschlossener Randpolygone wurde eine Vektorisierungsmethode entwickelt. Hierbei war zu beachten, daß mehrere Teilflächen innerhalb eines Tiefenlinineplanes enthalten sein können. Ausgehend von einem zu wählenden Randblatt kann ein Randpolygon eines zusammenhängenden Gebietes ermittelt werden [130]. Sind außerhalb der Gebietsbeschreibung Isolinen und damit auch Stützpunkte vorhanden, ist keine korrekte Triangulierung möglich.

Randhöhenschätzung ist einerseits für die teilweise nicht geschlossenen Tiefenlinienpläne und andererseits für die Identifizierung mehrerer Teilflächen innerhalb eines Tiefenlinienplanes erforderlich. Neben der Vektorisierung ist auch eine Generalisierung der Basisdaten durch Punktselektion möglich.

5.2.3 Zweidimensionale Modelle

Nachdem ein Vertikalschnitte in den Präprozessor eingelesen und gegebenenfalls mit den oben beschriebenen Methoden aufbereitet wurde, muß die Eingabedatei zur geometrischen Beschreibung für den Simulator erzeugt werden. Dazu dient die Methode “Build-Topology”. Mit ihrer Hilfe werden die erforderlichen Datenstrukturen (“HGM”-Format) erkannt und die einzelnen Subdomains identifiziert. Weiterhin dient diese Methode der Korrektur topologischer und geometrischer Inkonsistenzen, wie z.B. im Gebiet endende Polygonzüge oder sich schneidende Linien. Desweiteren wurde eine Clipping-Routine zur Definition eines beliebigen Ausschnitts des Untersuchungsgebietes implementiert.

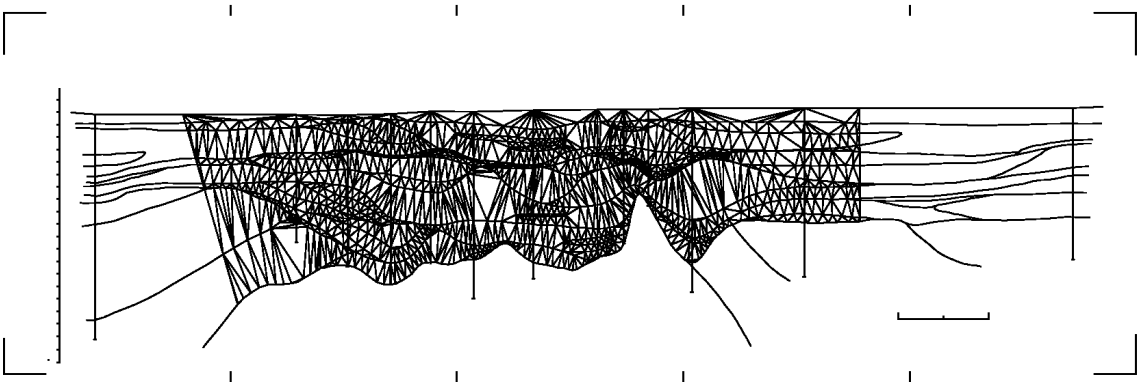


Abb. 5.4: Triangulierter Ausschnitt

Basierend auf den “HGM”-Strukturen ist eine weitere Datenausdünnung möglich. Einerseits kann wiederum der Douglas-Peucker-Algorithmus für einzelne Polygonzüge angewendet werden, anderseits ist auch Löschen, Vereinigen und Bearbeiten von Polygonzügen möglich. Eine Vereinfachung erhält man auch durch die Vergabe gleicher Eigenschaften an benachbarte Gebiete. Dabei ist allerdings zu beachten, daß innerhalb eines Gebietes auftretende Strukturlinien vom Grobgittergenerator des Simulators als Strukturlinien erkannt und entsprechend generiert werden.

5.2.4 Dreidimensionale Modelle

Die Triangulierung eines Tiefenlinienplanes führt zu einer diskretisierten Basisfläche einer hydrogeologischen Einheit, allerdings ohne korrekte Tiefe der Ränder. Die Randhöhenschätzung kann bereits während der Analyse mit dem Quadtree durchgeführt werden, wird jedoch auch durch auf den triangulierten Basisflächen basierenden Methoden unterstützt. Strukturlinien innerhalb des Gebietes werden durch eine Erweiterung des Netzgenerators zur Erzeugung von Zwangslinien generiert. Damit ist die Bearbeitung der Tiefenlinienpläne abgeschlossen und der Aufbau der 3D-Modelle kann erfolgen.

Es gibt zwei verschiedene Konzepte zur realitätsnahen dreidimensionalen Modellierung auf der Basis von Tiefenlinienplänen: Bei der ersten Modellierungsvariante werden zuerst alle Tiefenlinienpläne diskretisiert und anschließend mit parallelen Flächen im Raum verschnitten. Als Resultat erhält man benachbarte Vertikalschnitte. Diese können dann mit den entwickelten 2D-Methoden analysiert und bearbeitet werden. Anschließend müssen Linien gleicher Basisflächen benachbarter Vertikalschnitte identifiziert und miteinander verbunden werden. Da der größte Teil der hydrogeologischen Basisflächen nicht das gesamte Untersuchungsgebiet überdeckt, würde dieses Vorgehen erhebliche Schwierigkeiten bei der Modellierung von auslaufenden Schichten hervorrufen. Verwendet wurde diese Konzept daher vor allem zur Generierung von 3D-Modellen durch Expansion von Vertikalschnitten (siehe Abb. 5.5).

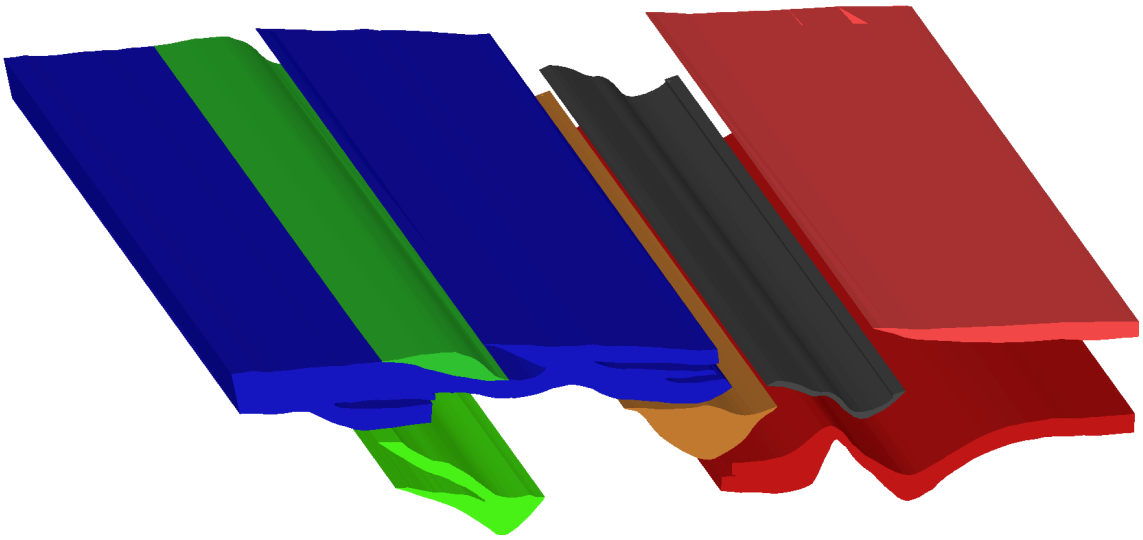


Abb. 5.5: Vertikal expandiertes 3D-Modell

Bei der zweiten Variante werden die Boundaries des Modells einerseits aus den Tiefenlinienplänen gebildet, andererseits werden Lücken zwischen benachbarten Tiefenlinienplänen durch neue, künstliche Flächen geschlossen. Der Modellaufbau erfolgt dabei durch sukzessives Hinzufügen der einzelnen Tiefenlinienpläne zu einem bereits vorhandenen Modell. Dieses Modell besteht am Anfang entweder aus einer äußeren Berandung in Form eines Dreiecksnetzes oder nur aus einer oberen Grenze, z.B. der Geländeoberkante, wobei diese auch aus einem Tiefenlinienplan erzeugt werden kann.

Ein Tiefenlinienplan wird hinzugefügt, indem das Ausgangsmodell (ein beliebiges Dreiecksnetz) mit dem neuen Tiefenlinienplan verschnitten wird (siehe Abb. 5.6). Dieser Prozeß führt zu Flächennetzen mit teilweise isolierten oder im Raum endenden Flächen. Bei der Modellierung ist außerdem auf eine konsistente Abbildung der Subdomains zu achten, d.h. mögliche Durchdringungen der modellierten Flächen müssen lokalisiert und korrigiert werden. Für die Generierung der Randbeschreibung eignen sich diese Flächen nicht, da hiermit kein geschlossenes Volumen definiert werden kann. Drei Methoden zum Schließen der Lücken wurden entwickelt:

- Erstellung eines vertikalen Randes und Verschneidung
  Basierend auf dem freien Randpolygon einer Fläche wird eine neue vertikale Fläche erzeugt, die mit dem bestehenden Modell verschnitten wird. Man erhält wieder im Raum endende Flächen. Diese können lokalisiert und weiterverarbeitet oder gelöscht werden.
- interaktive Auswahl von Polygonzüge und anschließende Triangulation
  Mit Hilfe der 2D-Methoden werden offene Randpolygone ermittelt. Diese können ausgewählt und so bearbeitet werden, daß durch Verbindung der Endpunkte eine Fläche beschrieben wird. Diese wird anschließend trianguliert. Liegen keine zueinander passenden Polygonzüge vor, können diese auch interaktiv innerhalb bestehender Flächen erzeugt werden.
- interaktive Anpassung des Randes an vorhanden Flächen
  Nach Auswahl der entsprechenden Polygonzüge werden diese verschmolzen, d.h. die Punkte des freien Randes werden auf bestehende Punkte verschoben. Dieses Vorgehen ist zur Modellierung von auslaufenden Schichten geeignet.

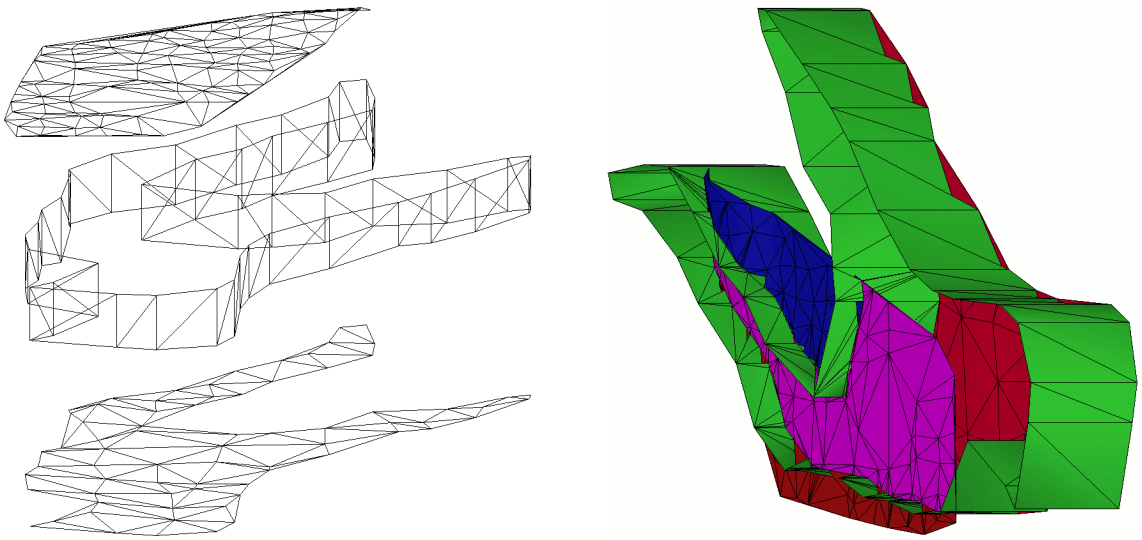


Abb. 5.6: Das Verschneiden von Flächen

Nach Anwendung einer oder mehrerer dieser Methoden entsteht ein zusammenhängendes Flächennetz ohne offene Ränder. Aus diesem Netz läßt sich nun ein dreidimensionales geometrisches Modell erzeugen. Zuerst werden automatisch die Elementgruppen ermittelt. Dabei wird eine Elementgruppe durch Kanten im Netz mit mehr als zwei Nachbarn berandet. Entlang dieser Kanten ist eine Orientierung der benachbarten Flächen möglich. Dies wurde dazu benutzt, eine automatische Volumenerkennung zu implementieren.

Während der Projektlaufzeit wurden mehrere dreidimensionale Datensätze erzeugt (siehe Abb. 5.7). Dabei zeigte sich, daß aufgrund von numerischen Ungenauigkeiten nicht in allen Fällen automatisch konsistente Flächennetze produziert werden können. Deshalb wurden zusätzlich Funktionen zur interaktiven Fehlererkennung und -beseitigung zur Verfügung gestellt.

Eine ausführliche Beschreibung aller Methoden zur Modellerstellung findet man im Benutzerhandbuch von d^3f [36].

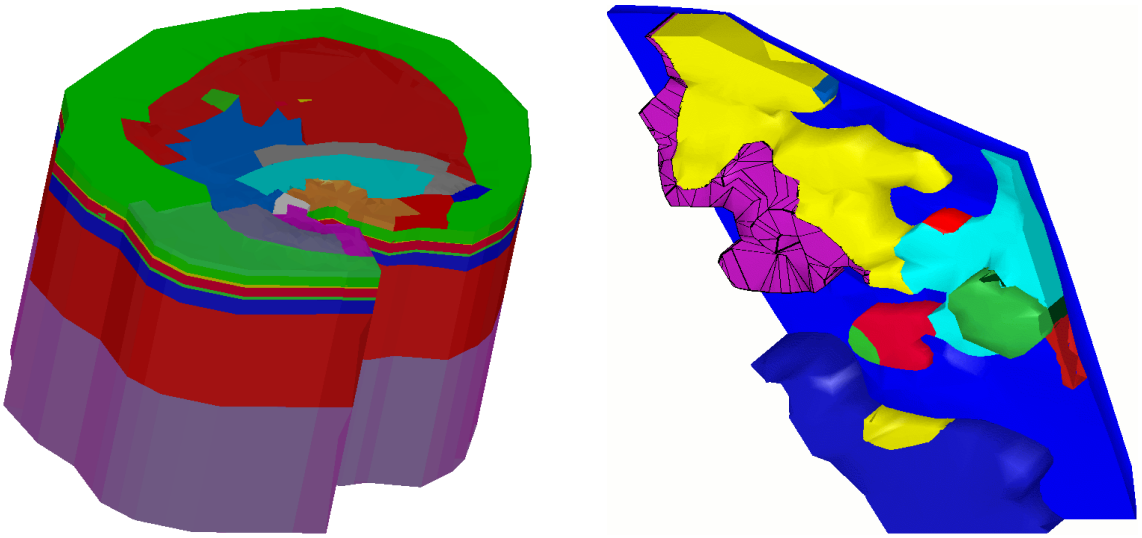


Abb. 5.7: Beispiele für 3D-Modelle

Insel Weizhou — 20 Subdomains

Gorlebener Rinne — 15 Subdomains, 57 Boundaries

5.2.5 Graphische Oberfläche

Die oben beschriebenen Werkzeuge zur Geometrieerstellung und -bearbeitung stehen unter einer graphischen Benutzeroberfläche zur Verfügung. Diese Oberfläche dient gleichzeitig zur interaktiven Erzeugung der vom Simulator benötigten Eingabedateien, die die hydrogeologischen Parameter, Rand- und Anfangsbedingungen sowie Quellen und Senkenenthalten. Als Ergebnis des Preprocessings liegen folgende fünf Dateien vor: geometry, hydrogeology, boundary, initial und source (siehe [36]).

5.3 Der Simulator d^3f

Bei der Entwicklung des Simulators wurden folgende Schwerpunkte, die im folgenden einzeln beschrieben werden, bearbeitet.

- Gittergenerierung
- Diskretisierung
- Fehlerschätzer
- Effiziente Löser
- Parallelisierung adaptiver Verfahren
- Zufallszahlengenerator für die stochastische Modellierung der Permeabilität

An die einzelnen Teilbereiche wurden hohe Anforderungen gestellt. So muß der Gittergenerator in der Lage sein, die komplexen hydrogeologischen Strukturen mit unterschiedlichen Elementtypen aufzulösen. Dabei ist die starke Anisotropie der zu erwartenden Rechengebiete zu beachten. Die Diskretisierung muß so gewählt sein, daß sie auf unstrukturierten, gemischten Gittern genaue und stabile Lösungen liefert. Auch die Einhaltung physikalischer Grundgleichungen (Erhaltungssätze) muß erfüllt sein. Die Fehlerindikatoren sollen es ermöglichen, problemangepaßte Rechengitter automatisch zu erzeugen. Auch die Zeitschrittweiten sollen automatisch an das Problem angepaßt werden.

Für alle drei Teilgebiete mußten als Grundlage umfangreiche theoretische Arbeiten geleistet werden. Für Probleme, wie sie vorgegeben waren, existierten in allen drei Teilbereichen nur unzureichende Kenntnisse. So war es nötig, sowohl eigene theoretische Arbeiten zu leisten als auch bereits vorhandene Ergebnisse auf die wesentlich komplexere Aufgabenstellung zu übertragen. Die so entwickelten Algorithmen wurden innerhalb des Programmpaketes UG der Universität Stuttgart implementiert und getestet.

5.3.1 Gittergenerator

Ziel dieses Aufgabengebietes war die Entwicklung eines Gittergenerators, der in der Lage ist, komplexe geologische Strukturen zu verarbeiten. Dabei waren mehrere Punkte zu beachten:

- Die zu untersuchenden Modellgebiete bestehen aus vielen Teilgebieten, die durch das Grobgitter aufgelöst werden müssen.
- Die Ausdehnung des Gebietes ist in x- und y-Richtung viel größer als in z-Richtung.
- Die Anzahl der Knoten und Elemente muß beschränkt bleiben, um Speicherprobleme zu verhindern und die Effizienz des Mehrgitteransatzes zu erhalten.

Zerlegt werden sollten diese Gebiete in
- 2D: Dreiecke, Vierecke
- 3D: Tetraeder und/oder Hexaeder

Der Plan, den in der Arbeitsgruppe Knabner entwickelten Gittergenerator IBG [139] für die gewünschten Erfordernisse zu modifizieren und zu erweitern, mußte aufgegeben werden, da Tests dieses Gittergenerators folgende Probleme zeigten:

- Um die gegebenen Geometrien sinnvoll aufzulösen, müssen sehr kleine Schrittweiten gewählt werden. Die Anzahl der entstehenden Knoten und Elemente für reale Geometrien wird zu groß.
- Es kann nicht garantiert werden, daß die Geometrie durch das entstehende Gitter richtig repräsentiert wird. Es konnte passieren, daß zusammenhängende Gebiete zerteilt und entstehende Teile falschen Teilgebieten zugeordnet wurden.

In der Literatur sind viele unterschiedliche Algorithmen zur Gittergenerierung in 2D bekannt, aber nicht alle lassen sich auf 3D-Probleme erweitern. Im folgenden werden kurz die untersuchten Algorithmen und ihre Beschränkungen aufgezeigt.

Paving/Plastering

Der Algorithmus erlaubt die Generierung von Viereckснetzen in 2D [23] und Hexaedernetzen in 3D [24]. Als Eingabe benötigt der Paving-Algorithmus in 2D eine explizite Be-

schreibung des Randes in Form von Geradenstücken. Ausgehend von diesen Geradenstücken werden nun Vierecke im Gebiet generiert. Das Verfahren ist relativ einfach. Die einzige Einschränkung an die Eingabedaten besteht darin, daß die Anzahl der Geradenstücke gerade sein muß. Es existiert eine Erweiterung des Paving auf dreidimensionale Probleme. Statt der Vierecke müssen nun Hexaeder generiert werden. Ausgehend von einer Beschreibung des Gebietes durch Vierecke werden die Hexaeder im Gebiet generiert. Allerdings werden im Dreidimensionalen sehr schnell die Grenzen des Algorithmus deutlich. Es ist selbst für relativ einfache Probleme unklar, wie eine Hexaederzerlegung aussieht, obwohl theoretisch eine solche Zerlegung existiert. Bis heute ist für dieses Problem noch keine Lösung gefunden worden.

Raster-Algorithmus

Im Gegensatz zum Paving/Plastering geht dieser Ansatz nicht vom Rand des Gebietes aus, sondern erzeugt im Inneren ein strukturiertes Gitter und versucht dieses am Rand anzupassen [140]. Dieses Vorgehen funktioniert sowohl in 2D als auch in 3D. Es tritt aber eine wesentliche Einschränkung auf. Das Verfahren läßt sich nicht auf Gebiete mit mehreren Teilgebieten erweitern, da sich im allgemeinen die Gitter an den Gebietsgrenzen nicht konform aneinander anschließen lassen. Dieser Ansatz war daher ebenso nicht sinnvoll für die gestellte Aufgabe.

Multi-Block-Verfahren

Die Idee des Multi-Block-Verfahrens [57] und [125] besteht darin, das Gebiet in einfache konvexe Teilgebiete zu zerlegen, die dann relativ einfach trianguliert werden können. Dabei treten aber folgende Schwierigkeiten auf:

- Für den ausgewählten Diskretisierungsansatz (siehe Kapitel 5.3.2) müssen die Gitter an den Blockgrenzen übereinstimmen. Dies kann bei einer großen Anzahl von Blöcken sehr aufwendig sein und führt zu einem sehr feinen Gitter.
- Algorithmen zur automatischen Zerlegung beliebiger Geometrien existieren. Allerdings sind die bisher bekannten Implementierungen nicht hinreichend stabil und reagieren empfindlich auf kleine Änderungen in der Geometrie.

5.3.1.1 Realisierte Lösung

Da die Entwicklung und Nutzung eines Gittergenerators für Hexaeder im Rahmen des Projektes für die gestellte Aufgabenstellung nicht möglich war, wurde beschlossen, sich bei der weiteren Entwicklung des Gittergenerators auf simpliziale Elemente (Dreiecke in 2D und Tetraeder in 3D) zu beschränken, dazu den Tetraedergittergenerator NETGEN [142] zu benutzen und geeignet zu modifizieren. Im weiteren Verlauf des Projekts kam eine Erweiterung auf Prismen hinzu.

In den nächsten Abschnitten wird auf die die Art der Elementgenerierung und die notwendigen Modifikationen eingegangen.

5.3.1.2 Advancing Front

Eine Klasse von Algorithmen zur Erzeugung von Dreiecks- bzw. Tetraedernetzen sind die Advancing-Front-Verfahren [56], [57], [122] und [123]. Hier wird, ausgehend von einer Oberflächenvernetzung, das Innere eines Volumens mit Dreiecken bzw. Tetraedern ausgelegt.

2D-Dreiecke

Aufgrund früherer Entwicklungen in der Arbeitsgruppe Wittum stand ein solcher Gittergenerator für Dreiecke bereits zur Verfügung. Dieser mußte an die neuen Eingabedaten angepaßt werden. Es stellte sich aber später heraus, daß diese Implementierung nicht alle Geometrien vernetzen konnte. In der Arbeitsgruppe Knabner wurde der Kern des bestehenden Gittergenerators nach dem Auftreten dieser Probleme neu implementiert. Nun sind beliebige Geometrien mit beliebigen Schrittweiten möglich. Zusätzlich konnte gezeigt werden, daß die in 2D generierten Dreiecksnetze die gestellten Anforderungen der Numerik erfüllen (siehe Kapitel 5.3.2).

3D-Tetraeder

Der Gittergenerator NETGEN lieferte die Möglichkeit, Gebiete als Schnitt einfacher geometrischer Objekte zu definieren und anschließend in Tetraeder zu zerlegen. Dabei stellte sich im Laufe der Arbeit heraus, daß die notwendigen Modifaktionen und Erweiterungen wesentlich aufwendiger waren, als ursprünglich angenommen.

Die Entscheidung, auf den geplanten Gittergenerator IBG zu verzichten, machte es nötig, das zu triangulierende Gebiet in einer ganz anderen Art zu beschreiben. Dazu wurde das LGM-Domain Konzept entwickelt. Dabei werden die Strukturen hierarchisch beschrieben [36].

- Beschreibung des Gebietes durch Teilgebiete
- Beschreibung jedes der Teilgebiete durch die umschließenden Oberflächen
- Beschreibung der Oberflächen durch eine Liste von Dreiecken und eine Liste von berandenden Linien
- Beschreibung der Linien durch eine Punkteliste

5.3.1.3 Oberflächentriangulierung

Der existierende Gittergenerator bot die Möglichkeit, die Oberflächen einfacher geometrischer Objekte zu triangulieren. Im Rahmen des Projekts war diese Aufgabe aber komplexer und aufwendiger. Alle Oberflächen wurden prinzipiell durch eine Liste von Dreiekken beschrieben. Prinzipiell hätten diese als Ausgangspunkt für die Tetraedergenerierung benutzt werden können. Dies hätte aber zu folgenden Problemen geführt:

- Die Elementgröße wäre nicht mehr beeinflußbar gewesen.
- Aufgrund der Entstehung dieser Oberflächenbeschreibungen als Ergebnis des Präprozessors ist die Größe der beschreibenden Dreiecke unterschiedlich. Weiterhin kann die Struktur der Elemente schlecht sein.

Dies kann auf ein sehr schlechtes Volumengitter führen, da diese Dreiecksflächen als Seiten der Tetraeder wieder auftauchen müssen. Es kann sogar soweit kommen, daß das Generieren eines Gitters unmöglich wird. Die genannten Gründe machten die Entwicklung eines Algorithmus zur Retriangulierung der Oberflächen notwendig. Das implementierte Verfahren ist ausführlich in [36] beschrieben.

5.3.1.4 Schrittweitenfunktion

Neben den komplexen geologischen Strukturen sind von der Geometrie her einfache Laborgeometrien von Interesse. Hier kann es sinnvoll sein, lokal mit einem feineren Gitter zu beginnen, falls

- der Anwender a priori weiß, wo eine feinere Auflösung im Gitter wünschenswert ist, oder
- extrem kleine Strukturen schon vom Grobgitter aufgelöst werden müssen.

Die Lösung dieses Problems war die Implementierung einer Schrittweitenfunktion, die die Elementgröße in Abhängigkeit vom Ort bestimmt.

5.3.1.5 Triangulierung dünner Schichten

Der verwendete Ansatz für den Gittergenerator geht von den Rändern aus und generiert im Innern des Volumens die Elemente. Bei isotropen Geometrien mit größenordnungsmäßig gleichen Längenausdehnungen macht dies keine Schwierigkeiten. Im Gegensatz dazu können bei anisotropen Geometrien Elemente entstehen, die den Anforderungen der Numerik nicht genügen. Solche Situationen sind weitgehend zu vermeiden. Die dazu notwendigen Modifikationen sind:

- **Anpassung der Oberflächentriangulierungen**
  Die oben beschriebenen Probleme resultieren aus der Tatsache, daß die die Oberfläche beschreibende Triangulierung an den gegenüberliegenden Flächen unterschiedlich ist. Um die Elementqualität zu verbessern, wurde ein Vorgehen entwik-

kelt, das die Triangulierung der oberen und unteren Oberfläche aneinander anpaßt. Dazu wird ein zusätzliches ebenes Dreiecksgitter generiert. Dieses wird dann auf alle nahezu flachen Oberflächen übertragen. Es ist klar, daß dieses Vorgehen auf das Innere der Oberflächen beschränkt und nicht für die Ränder anwendbar ist. Zwischen diesen beiden Dreiecken werden nun drei Tetraeder generiert. Dabei können am Rand Elemente entstehen, die nicht optimal sind.

- **Prismengenerierung**
  Wie oben beschrieben, werden zwischen zwei Dreiecken drei Tetraeder generiert. Dieses Volumen kann aber ebenso mit einem Prisma gefüllt werden. Das prismatische Element hat den Vorteil, daß es im Gegensatz zu Tetraedern anisotrop verfeinert werden kann. Beim anistropen Verfeinern werden einzelne Richtungen vom Verfeinern ausgeschlossen. Dadurch kann nach mehreren Verfeinerungen ein isotropes Gitter entstehen.

  Die Seitenflächen der Prismen bestehen aus Vierecken. Hier können als Nachbarelemente keine Tetraeder verwendet werden, da
  - ein nichtkonformes Gitter entstehen würde und
  - die Seitenflächen der Prismen bilineare Flächen sind, die sich nicht mit zwei Dreiecksflächen überdecken lassen, ohne daß ein Restvolumen übrigbleibt.

  Deshalb werden diese Seitenflächen mit Pyramiden mit einer viereckigen Grundseite abgeschlossen. Das verbleibende Volumen kann dann mit Tetraedern geschlossen werden.

5.3.1.6 Zusammenfassung

Die bisher triangulierten Geometrien und die entsprechenden Rechnungen haben gezeigt, daß ein Gittergenerator entwickelt wurde, der die gestellten komplexen Anforderungen erfüllt. Die Erzeugung von Hexaedergittern hat sich als nicht als sinnvoll erwiesen. Statt dessen wurde ein Generator zur Erzeugung eines Gitters aus Prismen, Pyramiden und Tetraedern implementiert. Die numerischen Eigenschaften der Prismen sind denen der Hexaeder sehr ähnlich. Tests haben gezeigt, daß auch für komplexe anisotrope Geo-

metrien Gitter mit wenig Knoten generiert werden können. Im Zweidimensionalen zeigte sich, daß die Generierung von Dreiecksnetzen ausreicht, um die Anforderungen der Numerik zu erfüllen.

5.3.2 Diskretisierung

Das Ziel der Arbeiten war eine Diskretisierung der Modellgleichungen für Dichteströmungen

- für unstrukturierte Gitter mit unterschiedlichen Elementtypen,
- basierend auf einem Finite Volumen Schema mit lokaler Massenerhaltung,
- mit exakter Geschwindigkeitsapproximation auch im Falle springender Koeffizienten,
- mir Erhaltung wichtiger qualitativer Eigenschaften, wie z.B. der Positivität der Konzentration, und
- dem Ausschluß numerischer Artefakte bei Geschwindigkeiten

zu entwickeln. Da die Methode der finiten Volumen als Diskretisierung verlangt war, wurde die Forderung nach lokaler Massenerhaltung automatisch erfüllt. Die verschiedenen Klassen der Finiten-Volumen-Methode unterscheiden sich hauptsächlich in der Konstruktion der finiten Volumen, in denen die lokale Massenerhaltung gilt. Zunächst wurden die sogenannte knotenzentrierten (node-centered) Klasse untersucht (siehe Abb. 5.8). Eine spezielle Variante davon, die sogenannte “baryzentrischen finite Volumen”, waren bereits in der UG-Bibliothek implementiert [12].

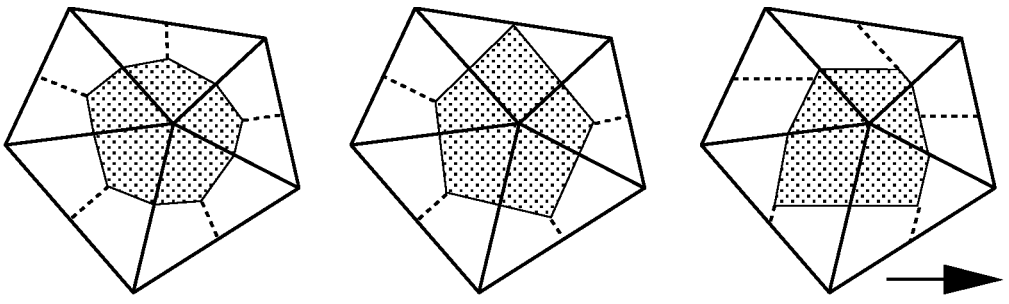


Abb. 5.8: Baryzentrische, Zirkumzentrische und Aligned Finite Volumen

Diese Methode ist nahe verwandt mit der Finite-Elemente-Methode [77], [64], [4] und profitiert davon auch bei der Benutzung der Standardinterpolation von finiten Elementen für

- die Approximation des tensoriellen diffusiv/dispersiven Flusses und
- der Diskretisierung von flußabhängigen Randbedingungen.

Die aufgeführten Eigenschaften stellen die Hauptvorteile im Vergleich zu anderen Finite-Volumen-Klassen - den sogenannten zellenzentrierten (cell-centered) Methoden - dar. Eine gemischte Finite-Elemente-Methode wurde ebenfalls in Erwägung gezogen. Diese Methode führt zu einem erhöhten Speicherbedarf und zu einer größeren Komplexität der Berechnungen, bietet jedoch eine bessere Approximation der Darcy-Geschwindigkeit. Ein weiterer Vorteil ist die lokale Massenerhaltung direkt in den finiten Elementen. Daher werden die Flüsse an physikalischen Grenzen, an denen sich die Permeabilität sprunghaft ändert, durch eine geeignete harmonische Mittelung approximiert werden (siehe z.B. [119]).

Testrechnungen mit der Standard-Finite-Volumen-Diskretisierung für die Transportgleichung und einer gemischten Finite-Elemente-Diskretisierung für die Strömungsgleichung bestätigten die oben erwähnten Vorteile im Vergleich zur baryzentrischen Finite-Volumen Diskretisierung [89]. Gleichzeitig zeigte sich, daß dieser Vorteil durch riesige Anforderungen an Computerresourcen und durch den erwarteten großen Zeitaufwand für weitere Forschungsarbeiten und die Implementierung wieder zu nichte gemacht wird. Daraufhin wurde beschlossen, nur mit der baryzentrischen Finite-Volumen-Diskretisierung weiterzuarbeiten. Erfahrungen ließen vermuten, daß die Benutzung einer neuen, konsistenten Geschwindigkeitsapproximation (siehe Kapitel 5.3.2.2) eine Approximation von vergleichbarer Güte wie die von Druck und Konzentration erlaubt, und daß die Unzulänglichkeiten in der Nähe von Grenzen mit springenden Koeffizienten durch lokale Gitterverfeinerungen aufgehoben werden können. Dadurch können die oben geschilderten Nachteile vernachlässigbar klein gehalten werden.

Über knotenzentrierte Finite-Volumen-Diskretisierungen für Dichteströmungen gab es keine Literatur. In der Vergangenheit wurden Finite-Elemente-Methoden ([166], [99], [171], [126]) bevorzugt, und nur für einen Integrale-Finite-Differenzen-Simulator lag

eine knappe Beschreibung vor [112]. Über die numerische Behandlung von speziellen Randbedingungen, wie z.B. gekoppelte Ausstromrandbedingungen oder implizit gegebene Einstrom/Ausstromgebiete, gab es praktisch keine Literatur. Erst kürzlich wurden von Konikow et al. [90] einige Konzepte für Randbedingungen bei Salzstrukturen veröffentlicht.

Die Diskretisierung des mathematischen Modells führt auf ein riesiges nichtlineares algebraisches System. Zum Zwecke der numerischen Lösung muß dieses zuerst linearisiert werden. In [126] ist der Vergleich von zwei grundlegenden Linearisierungsverfahren für unser Problem, nämlich der Newton- und der Picard-Linearisierung angegeben.

5.3.2.1 Approximation der Konzentration

Eine der Primärvariablen ist die Konzentration (Massenbruch), deren Wertebereich auf ein physikalisch bestimmtes Intervall beschränkt ist. Genau diese Einschränkung muß auch für die numerische Näherung gelten. Die Hauptursache für die Verletzung dieser Einschränkung sind Situationen, in denen die Konvektion über die Diffusion dominiert. Werden keine speziellen numerische Verfahren verwendet, können starke, nicht-physikalische Oszillationen auftreten. Damit werden Verletzungen der Wertebereichseinschränkung der Konzentration sehr wahrscheinlich. Die einfachste Methode solche Schwierigkeiten zu vermeiden, ist die Einhaltung der lokalen Peclet-Zahl durch ein lokal ausreichend feines Gitter. Vereinfachend kann gesagt werden, daß kein unphysikalisches Verhalten von numerischen Lösungen in konvektions-dominierten Bereichen auftritt, falls alle lokalen Peclet-Zahlen kleiner als eine feste kritische Peclet-Zahl sind. Da die lokalen Peclet-Zahlen direkt proportional zu einer charakteristische Elementlänge, z.B. der Kantenlänge sind, kann diese Bedingung durch Gitterverfeinerung erreicht werden. Dabei ist klar, daß für fast hyperbolische Probleme, d.h. wenn der diffusive Anteil fast vernachlässigbar ist, die Gitterverfeinerung zu nicht mehr handhabbaren Speicheranforderungen führen kann. Dann sollten andere Methoden, wie z.B. die Methode der Charakteristiken benutzt werden. Falls zusätzlich die Dispersion berücksichtigt wird, erscheint die Verwendung solcher spezieller Methoden für fast hyperbolische Situationen nicht nötig. Dieses wird auch in der Literatur unterstützt [166], [99], [112].

Trotzdem wurden einige numerische Methoden für konvektions-dominierte Probleme entwickelt. Speziell für Probleme vom Typ “Elder”, wo es keine Dispersion gibt, die Diffusion sehr klein ist, und große Konvektionsgeschwindigkeiten auftreten, sind insbesondere für drei-dimensionale Rechnungen diese Methoden nötig. Schließlich soll ein Benutzer nicht zum ausschließlichen Arbeiten mir sehr feinen Gittern gezwungen werden. Vielmehr sollte eine Diskretisierung entwickelt werden, die auch auf groben Gittern physikalisch akzeptable Lösungen ermöglicht. Aus dieser Sicht bieten sich für den konvektions-dominierten Transport Upwind-Methoden an, da sie die Diskretisierungseigenschaft der lokalen Massenerhaltung nicht zerstören, bereits erfolgreich im Zusammenhang mit UG benutzt wurden und in der Literatur für Konvektions-Diffusions-Probleme empfohlen werden.

Numerische Tests verschiedener Upwind-Methoden zeigten, wie auch in [4], [77] und [119] dargestellt, daß die einfachste Variante, das sog. “full upwind”, zuviel numerische Dispersion, die sich in unphysikalischen Lösungen bemerkbar macht, produziert. In den obengenannten Veröffentlichungen werden besser geeignete Verfahren wie “exponential”, “partial” und “hybrid” upwind vorgeschlagen. Alle Upwind-Methoden können praktisch dadurch erklärt werden, daß sie die standardmäßige lineare Interpolation für reine Diffu-

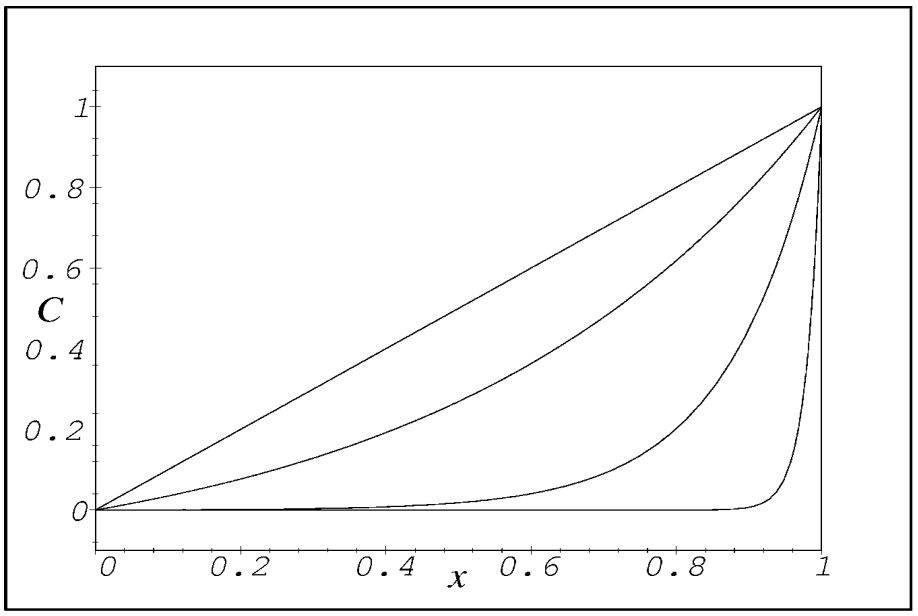


Abb. 5.9: Analytische Lösungen für eine 1D-Gleichung
für verschiedene Verhältnisse von Diffusion zu Konvektion
lineare Kurve: reine Diffusion; unterste Kurve: fast reine Konvektion

sionsprobleme durch eine besser geeignete “exponentielle” Interpolation ersetzen [4]. In Abb. 5.9 sind die Lösungen für eine einfache eindimensionale Konvektions-Diffusions-Gleichung für unterschiedliche Werte für Konvektion und Diffusion dargestellt. Die obere, lineare Kurve zeigt die Lösung für reine Diffusion, während die untere Kurve für sehr starke Konvektion gilt.

Für 2D- und 3D-Probleme ist die Situation nur für sog. zirkumzentrische Finite-Volumen (Voronoi Diagramme) verstanden und in der Literatur beschrieben. Dort erlaubt die spezielle geometrische Situation es, die lokale Diskretisierung wie im 1D-Fall zu behandeln. Unter Ausnutzung dieser Eigenschaft können weit fortgeschrittene Upwind-Modelle entwickelt und ihre Auswirkung auf das Minimum-Maximum-Prinzip untersucht werden. Für Dichteströmungen und die hier gewählte Finite-Volumen-Diskretisierung waren solche einfachen Erweiterungen nicht möglich. Es zeigte sich, daß nur einfache Upwind-Methoden realisiert werden konnten. Auch konnte nur für das “full upwind” die Gültigkeit des Minimum-Maximum-Prinzips gezeigt werden. All das ließ eine Verallgemeinerung der oben erwähnten upwind-Verfahren notwendig erscheinen.

5.3.2.2 Geschwindigkeitsapproximation

In dem häufig zitierten Papier von Voss und Souza wird festgestellt, daß der wichtigste Beitrag für eine erfolgreiche Modellierung von Dichteströmungen die konsistente Geschwindigkeitsapproximation ist ([166] Seite 1852 ff.). Es werden die Ursachen für numerische Artefakte in den Geschwindigkeiten, falls nicht-modifizierte, nicht-konsistente Geschwindigkeitsapproximationen benutzt werden, erläutert, sowie die dadurch entstehenden Einflüsse beschrieben. Die Autoren stellen fest, daß leicht künstliche (unphysikalische) Geschwindigkeiten in der Größenordnung von einigen Hundert m/a bei gewöhnlichen Modellrechnungen entstehen können. Am einfachsten kann die Fehlerursache im hydrostatischen Grenzfall verstanden werden, wenn die Fluiddichte sich nur in vertikaler Richtung ändert. Um hydrostatisches Gleichgewicht zu erhalten, muß die Druckänderung “eine Ordnung höher” als die Dichteänderung sein. Das bedeutet aber z.B. für konstante Dichte, daß sich der Druck in Richtung der Gravitation linear ändern muß. Ähnliches gilt natürlich auch für andere räumliche Variabilitäten der Dichte, wenn bei Abwesenheit von Quellen oder Senken im hydrostatischen Fall sich die Geschwindig-

keit Null einstellen muß. Unglücklicherweise ist dieses nicht der Fall für Diskretisierungen, bei denen im allgemeinen künstliche numerische Geschwindigkeiten für nicht-triviale Dichteabhängigkeiten auftreten können. Voss & Souza [166] folgerten daraus, daß bei einer konsistenten Geschwindigkeitsapproximation die Approximationen von Dichte und Druckgradient das gleiche räumliche Verhalten haben müssen.

Im Falle von Dreiecks - und Tetraeder-Elementen heißt das, daß die standardmäßige lineare Interpolation von Druck und Konzentration entweder durch eine Interpolation höherer Ordnung für den Druck oder aber niederer Ordnung für die Dichte ersetzt wird. Das erste kam wegen der großen numerischen Komplexität besonders im Zusammenhang mit einer großen Anzahl von Unbekannten nicht in Frage. Die zweite Möglichkeit würde dazu führen, daß die Dichte genau wie der Druckgradient in einem Element als konstant angesehen würde. Das Resultat wäre eine Lösungsgenauigkeit, die für Dichteströmungsberechnungen nicht akzeptabel ist. Für Elementtypen (Quader, Prismen, etc.), wo der Druckgradient innerhalb eines Elementes variieren kann, führt die Approximation von Voss und Souza formal zu zufriedenstellenden Ergebnissen. Unglücklicherweise geben die Autoren den Algorithmus nur für bilineare Elemente an. Zudem ist der Algorithmus nur für hydrostatische Zustände und einen linearen Zusammenhang von Dichte und Konzentration verstanden.

Letztlich wird das Problem der Geschwindigkeitsapproximation von vielen Autoren einfach ignoriert. Der Grund dafür liegt darin, daß viele Rechnungen nur für einfache Testprobleme mit strukturierten Gittern aus Rechtecken oder Quadern durchgeführt werden (siehe z.B. [112]). Für diese Beispiele reduzieren speziell gewählte Integrationspunkte oder sehr feine Gitterauflösungen in vertikaler Richtung die Effekte von künstlichen Geschwindigkeitskomponenten.

5.3.2.3 Entwicklungen und Ergebnisse

Alle Algorithmen, die für die Diskretisierung entwickelt wurden sind im Benutzerhandbuch [36] ausführlichst beschrieben. An dieser Stelle werden nur die Neuentwicklungen vorgestellt und gezeigt, daß die Anforderungen [47] erfüllt werden.

Eine Finite-Volumen-Diskretisierung basierend auf baryzentrischen Elementen wurde für Drei- und Vierecke in 2D und für Tetraeder, Prismen, Pyramiden und Hexaeder in 3D implementiert. Hierdurch wird erreicht, daß allgemeine unstrukturierte und gemischte Gitter zur numerischen Lösung zur Verfügung stehen und die Masse lokal erhalten bleibt. Das gleiche gilt auch für die Diskretisierung von Quellen bzw. Senken und für alle geforderten Randbedingungen. Insbesondere bei der Kombination der Randbedingungen “Ausstrom” für die Konzentration und “Dirichlet” für den Druck werden numerische Artefakte vermieden.

Weiterhin werden alle Nichtlinearitäten und Kopplungen der Gleichungen erhalten. D.h., im Normalfall werden keine Vereinfachungen wie Oberbeck-Boussinesq-Approximation, explizite Zeitschrittverfahren oder Picard-artige Linearisierungen benutzt. Die Ausnahme bildet die Bestimmung der Umschlagpunkte zwischen Einstrom- und Ausstromgebieten in der sog. “inout”-Randbedingung. Diese werden mit einem expliziten Verfahren aus dem vorhergehenden Zeitschritt bestimmt. Im anderen Fall könnten nicht-triviale Probleme während der Iterationen des nichtlinearen Lösers auftreten, die durch das Umschalten zwischen der Dirichlet und der Flußrandbedingung entstehen. Für ihre Behebung wäre eine Änderung des Gesamtkonzeptes von UG nötig gewesen.

Alle Nichtlinearitäten des algebraischen Gleichungssystems werden unter Verwendung analytischer Funktionen für die Ableitungen der nichtlinearen Koeffizienten (Dichte, Viskosität, Scheidegger Dispersion) behandelt. Die Erfahrungen in [126] bezüglich der Konvergenz der nichtlinearen Löser wurde bestätigt. D.h., daß eine vollständige nicht-vereinfachte analytische Linearisierung nötig war, um die Konvergenz der numerischen Löser für komplexe Probleme mit großen Dichtekontrasten und anisotroper, von der Geschwindigkeit abhängender Dispersion sicherzustellen. Es wurden viele Testrechnungen durchgeführt, um durch eine Vereinfachung der analytischen Linearisierung, speziell die des Dispersionstensors, die Konvergenzrate der linearen Löser zu erhöhen. Dabei zeigte es sich, daß jede Abweichung von einer kompletten analytischen Linearisierung eine Verringerung der Konvergenzrate des nichtlinearen Lösers bewirkt. Für die Linearisierung wurde auch eine numerische Differentiation implementiert und insbesondere zu Beginn des Projektes benutzt. Es stellte sich aber heraus, daß diese Art der Linearisierung für

hoch nichtlineare Probleme versagt und außerdem signifikant höhere Rechenzeiten benötigt. Einzelheiten zur Linearisierung und zur Diskretisierung von dichtegetriebenen Strömungen in porösen Medien können in [54] und [36] gefunden werden.

5.3.2.3.1 Minimum/Maximum-Prinzip

Die Diskretisierung sollte so beschaffen sein, daß die berechnete Lösung für die Konzentration das sogenannte diskrete Minimum/Maximum-Prinzip erfüllt, d.h. daß diese bekannte Eigenschaft der analytischen Lösung für die Konzentration auch von der numerischen Lösung erfüllt wird.

Dieses Ziel wurde erreicht. Für Dreieck-Elemente ist der theoretische Hintergrund in [54] beschrieben. Es wird unter minimalen Voraussetzungen gezeigt, daß der Minimal- bzw. Maximalwert der numerischen Lösung der Transportgleichung vorgegeben werden muß durch einen Wert:

- einer Dirichlet Randbedingung;
- von Anfangsbedingungen;
- einer Einstromrandbedingung;
- eines Quellterms.

Die Annahmen, die zur Gewährleistung des diskreten Minimum/Maximum-Prinzips getroffen werden, stammen aus der Herleitung für die die Laplace-Gleichung. Sie sind notwendige Voraussetzung auch für diese erheblich komplizierteren Gleichungen. Die wichtigste Voraussetzung ist eine “gute” Qualität des Gitters. Dafür darf ein Dreiecks-Element keinen Winkel größer als $\pi/2$ haben. Weiterhin kann das Minimum/Maximum-Prinzip verletzt werden, wenn die Diffusion innerhalb eines Elementes variieren kann. Im allgemeinen werden für realistische Anwendungen nicht beide Bedingungen eingehalten werden. Besonders für sehr komplexe Gebiete mit komplizierten Strukturen geringmächtiger Schichten ist es unmöglich, insgesamt eine ausreichende Qualität des Gitters zu erreichen. Der Diffusionstensor variiert in unserem Falle nicht innerhalb eines Elementes. Bei dem Dispersionstensor werden solche Variationen aber zur größeren Genauigkeit der Approximation bevorzugt, für Einzelheiten siehe Kapitel 5.3.2.2.

Es zeigte sich sehr häufig, daß nur dann lokal einige negative Werte der Konzentration auftraten, wenn alle oben aufgeführten Negativfaktoren im gleichen Teil des Domains auftraten, nämlich dort wo die Gitterqualität schlecht war (große Winkel) und wo alle Parameter große Variationsbreiten aufwiesen.

Durch numerische Experimente wird nahegelegt, daß alle in [54] dargestellten Ergebnisse auch auf andere Elementtypen übertragen werden können.

5.3.2.3.2 Upwind-Methoden

Upwind-Verfahren haben einige Vorteile bei der numerischen Behandlung des Konvektionsanteils der Transportgleichung. Sie sind sehr gut untersucht und verstanden und ausführlich in der Literatur beschrieben. Sie zerstören nicht die lokale Massenerhaltung der Finite-Volumen-Diskretisierung und sie werden von der UG-Software-Bibliothek [12] massiv unterstützt.

Sowohl die verfügbare Literatur als auch theoretische und numerische Untersuchungen zeigen, daß es sich bei typischen realitätsnahen Anwendungen um konvektionsdominierte Probleme handelt. Deshalb wird für hinreichend feine Gitterauflösung lokales, nichtphysikalisches Verhalten der Lösung im allgemeinen nur an Stellen beobachtet, an denen die Geschwindigkeiten ihre größten Werte erreichen. Vergleiche Abbildung 5.10 für das Elder Problem wo signifikante (negative) Oszillationen in der Nähe des Randes mit den vorgegebenen großen Dichte gradienten auftreten.

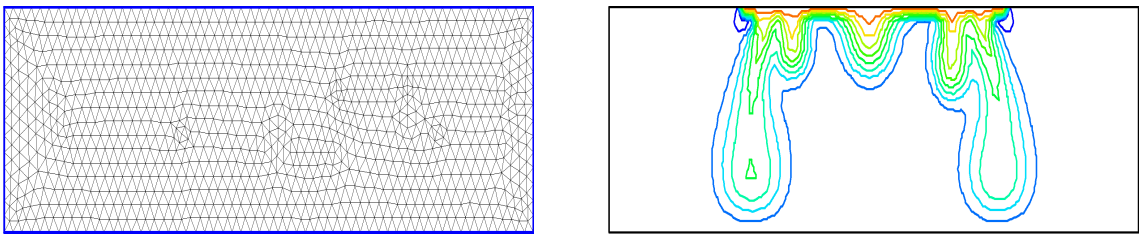


Abb. 5.10: Gitter und numerische Lösung für “no upwind”

Das einfachste Upwind-Verfahren, das sogenannte “full upwind”, ist einfach zu implementieren und liefert Diskretisierungsmatrizen mit guten Eigenschaften bezüglich der Konvergenz der numerischen Löser (M-Matrix-Eigenschaft). Der Preis hierfür sind die großen Modifikationen der Standarddiskretisierung, die durch das Hinzufügen einer künstlichen Diffusion entstehen. Diese besitzt kein physikalisches Analogon und verschmiert auf unphysikalische Weise die Konzentrationsfront.

In der bereits zu Projektbeginn existierenden Literaturübersicht werden weiterentwickelte Upwind-Methoden für zwei- und dreidimensionale unstrukturierte Gitter beschrieben, aber nur für zirkumzentrische Finite-Volumen-Diskretisierungen vorgeschlagen.

Es konnte gezeigt werden, daß diese Ideen auch auf die hier verwendete Finite-Volumen-Diskretisierung und auf alle Upwind-Methoden verallgemeinert werden können. Dazu gehört auch die am besten geeignete Methode, das “exponential upwind”-Verfahren. Mit dieser Methode erhält man Lösungen, die das diskrete Minimum/Maximum-Prinzip erfüllen, aber nicht die Nachteile der “full upwind” Methode besitzen. Theoretische Ergebnisse sind in [54] aufgeführt. Für den Vergleich verschiedener Upwind-Methoden siehe Abbildung 5.11.

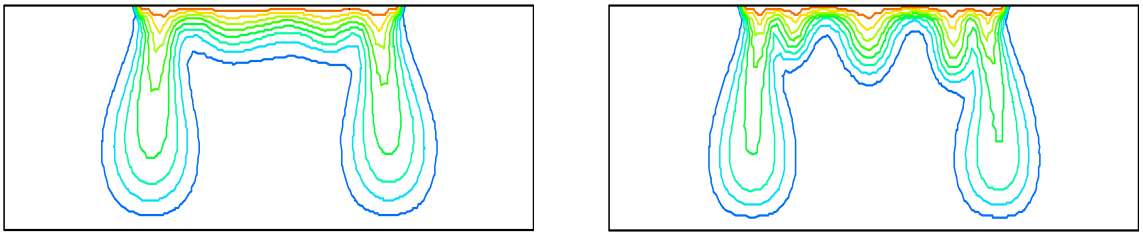


Abb. 5.11: Vergleich verschiedener Upwind-Methoden
full upwind (links), partial upwind (rechts)

Alle oben erwähnten Verfahren sind in d^3f implementiert, so daß der Benutzer unter verschiedenen Upwind-Verfahren wählen kann. Dazu gehört die “no upwind”-Methode, falls eine höhere Lösungsgenauigkeit verlangt wird und die Gitterauflösung fein genug ist. Den besten Kompromiß stellt das “partial upwind”-Verfahren dar, während die numerisch am besten angepaßte Methode, die gleichzeitig auch die komplexeste bezüglich des Rechenaufwandes ist, das “exponential upwind”-Verfahren ist.

Weiterhin wurde die sogenannte Aligned-Finite-Volume-Diskretisierung von K. Johannsen implementiert. Dadurch wird der generelle Nachteil aller Upwind-Methoden, der sogenannte Grid-Effekt, reduziert [79], [4], [36], [54].

5.3.2.3.1 Diskretisierung des Darcyschen Gesetzes

Die Bestimmung der Strömungsgeschwindigkeiten ist ein wichtiger Teil der numerischen Simulation von Dichteströmungen in porösen Medien. Die Notwendigkeit für eine extrem hohe Güte der Approximation ergibt sich aus der Abhängigkeit des Konvektionsanteils und des Dispersionstensors im dispersiv/diffusiven Anteil der Transportgleichung von der Darcy-Geschwindigkeit. Zusätzlich wird der wichtigste Anteil der nichtlinearen Kopplung von Strömungs- und Transportgleichung durch die Abhängigkeit der Darcy-geschwindigkeit von der Dichte hervorgerufen.

Die numerische Approximation der Darcy-Geschwindigkeit ist in der implementierten Finite-Volumen-Diskretisierung in d^3f von gleicher Güte wie die anderer physikalischer Größen, wie z.B Konzentration und Druck. Die Ursache hierfür liegt in den neuen Ergebnissen dieses Projektes auf dem Gebiet der konsistenten Geschwindigkeitsapproximation, aber auch in der insgesamt sorgfältig durchgeführten Diskretisierung.

Die Variabilität der Geschwindigkeit wird niemals durch die Diskretisierung unnötigerweise eingeschränkt. Dazu werden an jedem Integrationspunkt, an dem die Geschwindigkeit bestimmt werden muß, die aktuellen (nichtlinearen) Werte von Konzentration und Druck benutzt.

Die Geschwindigkeitsapproximation ist in den Diskretisierungen von Strömungs- und Transportgleichung identisch. Dieses ist eine nicht nur vom physikalischen Gesichtpunkt selbstverständliche Anforderung. Sie ist ebenfalls erforderlich, um nichtphysikalische Oszillationen der Konzentration auszuschließen (siehe Kapitel 5.3.2.1).

Da die Dispersion von der Geschwindigkeit abhängt, wurde die übliche Einschränkung der Diffusion auf eine Konstante innerhalb eines Elementes für die Dispersion selbst aufgegeben. Das heißt, daß wiederum an jedem Integrationspunkt die aktuellen (nichtlinea-

ren) Werte von Konzentration und Druck benutzt werden. Damit wird in der hier benutzten numerischen Approximation die Dispersion variabel innerhalb eines finiten Elementes. Vom theoretischen Standpunkt aus kann eine solche Approximation lokale nichtphysikalische Oszillationen bewirken. Dieses kann insbesondere dann auftreten, wenn die Variationen der Geschwindigkeit innerhalb eines Elementes sehr groß und zusätzlich die geometrischen Eigenschaften des Elementes schlecht sind (siehe auch [54]). Trotzdem haben die numerischen Testrechnungen keinen signifikanten Hinweis auf das Auftreten solcher numerischen Artefakte ergeben. Somit profitieren die Simulationen mit d^3f von der besseren numerischen Approximation der Dispersion.

Zusammenfassend kann zu der Geschwindigkeitsapproximation gesagt werden, daß eine hohe Genauigkeit für die Darcy-Geschwindigkeit erwartet werden kann, solange die wichtigste Bedingung, nämlich die konsistente Geschwindigkeitsapproximation, erfüllt ist.

5.3.2.3.2 Konsistente Geschwindigkeitsapproximation

Wie bereits in 5.3.2.2 erwähnt wurde, erfüllten die in der Literatur beschriebenen Algorithmen für konsistente Geschwindigkeitsapproximationen die Anforderungen nicht zufriedenstellend. Die Methoden waren nur für rechteckige [166] und quaderförmige [99] finite Elemente bekannt. Dabei wurde zusätzlich noch von hydrostatischen Bedingungen und einer linearen Abhängigkeit der Dichte von der Konzentration ausgegangen.

In diesem Projekt wurden die Methoden für andere Elementtypen entwickelt und weiterhin auf allgemeine hydrodynamische Situationen und auf eine beliebige Abhängigkeit der Dichte von der Konzentration erweitert. Dazu wurde der Algorithmus von Voss & Souza zunächst auf lokale Referenzelemente erweitert [88], [51]. Damit war die Ableitung der konsistenten Geschwindigkeitsapproximation für beliebige affine und isoparametrische finite Elemente auch für nicht-hydrostatische Zustände gegeben. Für eine lineare Abhängigkeit der Dichte von der Konzentration ist der in [88] dargestellte Algorithmus identisch mit dem von Voss & Souza, während für nichtlineare Abhängigkeiten der Algorithmus von Voss & Souza nur näherungsweise gilt. Dieser Algorithmus wurde in d^3f implementiert und getestet. Für bi- (quadrangles) bzw. trilineare (hexahedra) Elemente waren die Ergebnisse zufriedenstellend, für lineare (triangles und tetrahedra) Elemente nicht.

Ein beobachtbarer Nachteil dieses Algorithmus ist, daß er für diese Elemente nicht eindeutig definiert ist. Es können nämlich in Abhängigkeit von der Wahl der linearen Transformation zwischen globalen und lokalen Elementen unterschiedliche Werte für die konsistente Geschwindigkeitsapproximation, die alle sowohl physikalisch als auch numerisch akzeptabel erscheinen, berechnet werden.

Der Idee von Voss & Souza strikt folgend, muß vorausgesetzt werden, daß bei konsistenter Geschwindigkeitsapproximation der Geschwindigkeitsvektor für lineare Elemente innerhalb eines Elementes konstant sein muß, falls die Variabilitäten von Permeabilität und Viskosität innerhalb eines Elementes vernachlässigt werden. Dieses folgt aus der Tatsache, daß die Approximation des Druckgradienten für lineare Elemente konstant ist und die Abhängigkeit des Gravitationsterms die gleiche sein sollte (siehe Abbildung 5.12 linker Teil).

Diese Bedingung von Voss and Souza stellte sich als zu restriktiv heraus. Es konnte gezeigt werden, daß ein Verfahren ohne Transformation auf ein lokales Referenzelement, d.h. insbesondere unabhängig von der Benutzung einer speziellen numerischen Methode, abgeleitet werden kann. Dazu muß nur ein Teil der Dichtevariation auf eine konsistente Form bezüglich des Druckgradienten reduziert werden, während der restliche Teil weiterhin in der üblichen nicht-reduzierten Form berücksichtigt wird. Dieser Algorithmus für eine konsistente Geschwindigkeitsapproximation wurde in diesem Projekt entwickelt und ist erstmals in [36] beschrieben. Für hydrostatische Bedingungen hat er eine identische Form wie die Verallgemeinerung [88] des Algorithmus von Voss and Souza. Für allgemeine hydrodynamische Bedingungen jedoch erhält man eine andere und insbesondere qualitativ bessere Approximation.

Dieser Algorithmus ist in d^3f für Dreiecke and Tetraeder implementiert. In einer Vielzahl numerischer Tests zeigte sich eine signifikante Verbesserung der Approximation, wie auch in Abbildung 5.12 deutlich wird.

Obwohl dieser neue Algorithmus für eine konsistente Geschwindigkeitsapproximation formal auch für beliebige finite Elemente ableitbar ist, wird er in d^3f nicht für andere Elemente benutzt. Die Ursache hierfür ist der Hauptnachteil von isoparametrischen Elementen (Vierecke, Prismen, Pyramiden und Hexaeder), daß die spezielle Form der Interpo-

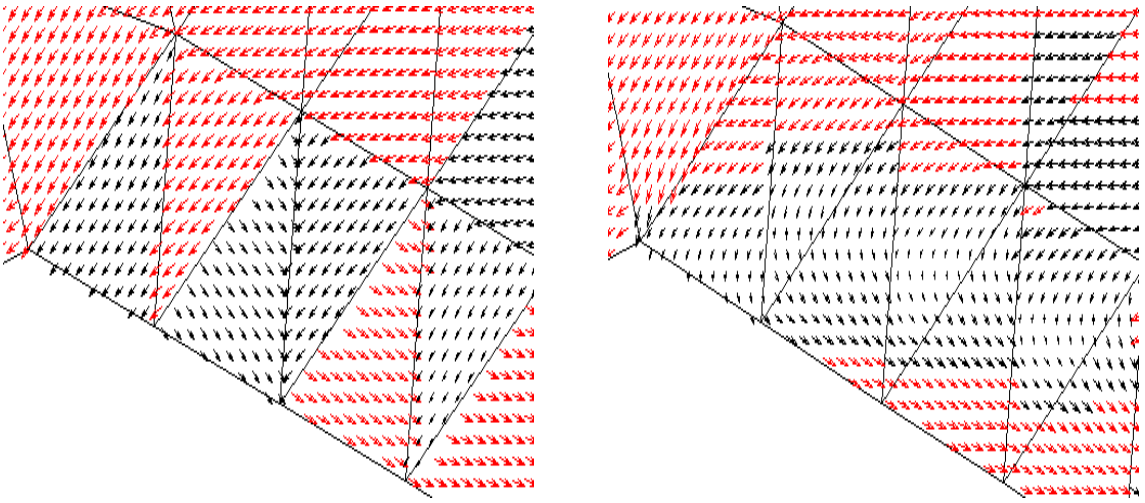


Abb. 5.12: Geschwindigkeitsapproximationen
links: Verallgemeinerung des Algorithmus von Voss & Souza
rechts: Neue, konsistente Geschwindigkeitsapproximation

lationsfunktionen nicht explizit für globale Koordinaten, sondern nur für das lokale Referenzelement bestimmt werden kann. Somit kann die neue konsistente Geschwindigkeitsapproximation für isoparametrische Elemente nicht wie bei linearen Elementen explizit, sondern nur numerisch berechnet werden. Dies wäre numerisch sehr aufwendig und zudem wahrscheinlich numerisch instabil. Aus diesen Gründen und bestärkt durch einige Testimplementationen wird für Vierecke, Prismen, Pyramiden und Hexaeder die konsistente Geschwindigkeitsapproximation in d^3f mit Hilfe des in [88] beschriebenen Algorithmus, basierend auf dem lokalen Referenzelement, berechnet.

Für Tetraeder und Hexaeder zeigten theoretische und numerische Untersuchungen, daß der Algorithmus eine Approximation von guter Qualität erzeugt. Ähnliche Erfahrungen konnten für Prismen gewonnen werden. Dennoch muß darauf hingewiesen werden, daß die Implementation der Prismen erst kurz vor Projektende zur Verfügung stand und deshalb keine ausreichend große Anzahl von Tests durchgeführt werden konnten. Aus theoretischer Sicht müssen für Prismen zumindest teilweise ähnliche Nachteile wie für Dreiecke erwartet werden (Nichteindeutigkeit).

Auch für Pyramiden steht die konsistente Geschwindigkeitsapproximation aus [88] für erfahrene Benutzer zur Verfügung. Die Standardeinstellung (default) ist jedoch nicht-konsistente Form. Einzelheiten sind in [88] und [36] erläutert. Das heißt, daß für große Geschwindigkeitsvariationen innerhalb von Pyramiden numerische Artefakte in den geschwindigkeiten entstehen können. Die nicht-konsistente Form der Approximation von Darcy-Geschwindigkeiten wird im Falle von Pyramiden benutzt, da hier die Transformation auf das lokale Referenzelement unstetig ist. Pyramiden werden jedoch nur aus “geometrischen” Gründen benötigt, um gemischte Gitter aus Prismen und Hexaedern zu ermöglichen, d.h. sie treten nur als Abschlußelemente und daher in relativ geringer Zahl auf. Vom numerischen Standpunkt aus besitzen sie generell keine guten Eigenschaften.

5.3.2.4 Zusammenfassung

Die Diskretisierung bei Dichteströmungsproblemen beruht auf einer Finite-Volumen-Methode für unstrukturierte, gemischte Gitter. Die Eigenschaft der lokalen Massenerhaltung ist gewährleistet. Dies gilt auch für die Diskretisierung aller implementierten Randbedingungen und der Quellen- und Senkenterme.

Alle Nichtlinearitäten und Kopplungen der beiden Gleichungen werden in einer nicht-vereinfachten Form erhalten, nur die Umkehrpunkte zwischen Einstrom- und Ausstrombereichen werden explizit aus der Lösung im dem vorhergehenden Zeitschritt berechnet. Für Simulationen mit sehr großen Zeitschritten steht eine explizite Linearisierung der Dispersion optional zur Verfügung. Die gesamte analytische Linearisierung ist so implementiert, daß sie das Verhalten der nichtlinearen Löser signifikant verbessert.

Durch die Diskretisierung der Transportgleichung und der Strömungsgleichung mit variabler Dichte entstehen in d^3f algebraische Gleichungen, deren Lösung das Minimum/Maximum-Prinzip erfüllen. Diese Bedingung kann nur verletzt werden in Bereichen mit schlechter Gitterqualität (große Winkel), wenn gleichzeitig große Datenvariationen auftreten. Werden diese Fälle ausgeschlossen, so können bei impliziter Linearisierung der Dispersion keine Über- oder Unterschreitungen des Konzentrationsminimums oder -maximums und auch keine unphysikalischen Oszillationen auftreten.

Für die in diesem Projekt zu lösenden konvektionsdominierten Differentialgleichungen sind Upwind-Methoden sehr gut geeignet. Hierdurch stehen dem Benutzer in Abhängigkeit von der Komplexität der Probleme und von der gewünschten Genauigkeit der Approximation eine stattliche Anzahl von Möglichkeiten zur Verfügung.

Durch eine sorgfältige Diskretisierung der Darcy Geschwindigkeit und durch die Anwendung neuer Erkenntnisse bezüglich der Konsistenz von Geschwindigkeiten wird eine Approximationsgüte erreicht, die der Primärvariablen Druck und Konzentration vergleichbar ist. Die Implementierung in d^3f ist ohne signifikanten Verlust an Approximationsgüte effizient und ökonomisch. Es besteht daher keine Notwendigkeit, auf eine andere Diskretisierungsmethode, wie zum Beispiel gemischte finite Elemente, zurückzugreifen. Diese Methoden erfordern erheblich mehr Aufwand an Speicher und Rechenzeit, und sie sind sowohl algorithmisch als auch theoretisch für die hier vorliegenden Probleme in der Literatur noch nicht ausreichend untersucht.

Neue Erkenntnisse bezüglich der Verallgemeinerung des Algorithmus von Voss und Souza [166] sind in [88] und [51] veröffentlicht. Sie erweitern den Algorithmus auf allgemeine hydrodynamische Verhältnisse und auf beliebige Abhängigkeiten der Dichte von der Konzentration. Der Algorithmus ist für Vierecks-, Prismen- und Hexaederelemente implementiert.

Ein neuer Algorithmus für eine konsistente Geschwindigkeitsapproximation wurde entwickelt [36] und erfolgreich für Dreiecke und Tetraeder implementiert. Alle theoretischen Untersuchungen und numerischen Tests zeigten, daß die Geschwindigkeitsapproximationen für diese Elemente Eigenschaften haben, die mit denen von Elementen höherer Ordnung, wie z.B. Prismen, vergleichbar sind.

Auf Grund dieser Tatsachen empfiehlt es sich aus numerischer Sicht, im zweidimensionalen Fall Dreiecks- oder in einfachen Fällen Viereckgitter zu benutzen. In dreidimensionalen Fall wird die Benutzung von Tetraedern oder alternativ Hexaedern empfohlen. Gemischte Gitter, die aus Tetraedern, Prismen und Pyramiden bestehen, werden empfohlen, wenn andere Kriterien, wie z.B. anisotrope Verfeinerung, von größerer Bedeutung sind.

5.3.3 Fehlerschätzer

Ziel dieses Aufgabenbereiches war es, einen a-posteriori Fehlerschätzer für die Finite-Volumen-Diskretisierung zu entwickeln. Dieser Fehlerschätzer soll als Grundlage für einen Algorithmus zur Gitteradaption verwendet werden. Eine Gitteradaption ist notwendig, da Modellgebiete von hoher Komplexität und großer Ausdehnung bearbeitet werden müssen. Durch adaptive Gitter können solche Probleme mit einer verhältnismäßig geringen Anzahl von Unbekannten hinreichend genau approximiert werden. Zusätzliche sollte eine Möglichkeit geschaffen werden, die Zeitschrittweiten zu steuern.

Im allgemeinen werden für die Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen Finite-Element-Verfahren benutzt. Aus diesem Grund liegen auch für diese Art der Approximation die meisten Untersuchungen über Fehlerschätzer vor. Für Finite-Volumen-Verfahren existieren nur wenige Arbeiten. Für unsere Arbeit grundlegend war eine Arbeit von Angermann [5] für ein lineares Modellproblem mit konvektivem Anteil. Die wesentlichen Arbeiten bezüglich a-posteriori Fehlerabschätzungen für elliptische Differentialgleichungen beziehen sich auf lineare oder schwach nichtlineare Probleme. Für die Behandlung von parabolischen Problemen liegen Arbeiten von Eriksson & Johnson ([40], [41], [42] und [43]) aus den Jahren 1991 und 1995 vor. Hier werden jedoch ebenfalls nur lineare und schwach nichtlineare Probleme und eine spezielle Zeitdiskretisierung betrachtet. Aus diesen Grund konnten die Ergebnisse von Eriksson & Johnson nicht auf das vorliegende Problem übertragen werden. Zusammenfassend kann gesagt werden, daß es für nichtlineare Gleichungen, wie sie in unserem Fall vorliegen, zum Zeitpunkt des Projektbeginns keine a-posteriori Fehlerschätzer gab.

5.3.3.1 Theoretische Grundlagen

Für die adaptive Gitterverfeinerung war die Entwicklung eines quantitativen a-posteriori Fehlerschätzers notwendig. Der von Angermann [2] entwickelte Fehlerschätzer wurde auf nichtlineare Problem übertragen. Für die Gitteradaption ist nur die Betrachtung des elliptischen Anteils des Fehlers nötig. Die Trennung des elliptischen und des zeitabhängigen Fehlers der Approximation wurde nach der Methode von Bieterman & Babuska vollzogen [18], [19]. Ein Gesamtfehlerschätzer für das parabolische Problem konnte auf

Grund der Komplexität der Problemstellung in der Kürze der Zeit nicht entwickelt werden. Auch der Fehlerschätzer für den elliptischen Anteil konnte nicht erschöpfend bis in letzte Detail bewiesen werden. Hierfür wäre ein längerfristige Untersuchung der Gleichungen und der gewählten Diskretisierung notwendig gewesen.

Der Fehlerschätzer für den elliptischen Anteil entspricht in seinen Grundzügen denen, die aus der Literatur für Finite-Element-Verfahren bekannt sind. Durch die Finite-Volumen-Diskretisierung entstehen jedoch zwei zusätzliche Terme aus der Quadratur der auftretenden Integrale. So setzt sich der Fehlerschätzer aus vier wesentlichen Indikatoren zusammen: dem Residuum der Gleichungen, dem Sprung der Flußterme über die Elementkanten und zwei Indikatoren als Repräsentanten des Quadraturfehlers.

Es hat sich gezeigt, daß ein a-posteriori Fehlerschätzer entwickelt wurde, der gute Ergebnisse für die Gitteradaption liefert. Der Fehlerschätzer konnte nicht nur für simpliziale Elemente, sondern auch für andere Elementtypen hergeleitet werden. Für solche Elementtypen lagen bisher keine Untersuchungen vor. Die Grundlagen können in den folgenden Arbeiten nachgelesen werden [6], [53], [89] und [158].

Für die Zeitschrittweitensteuerung wurde auf allgemein bekannte Verfahren zurück gegriffen. Hier war eine eingehende Betrachtung der benutzten Diskretisierung notwendig. Zur Zeitdiskretisierung ist das implizite Eulerverfahren benutzt worden. Diese Methode bietet von sich aus keinen Ansatz für eine Zeitschrittweitensteuerung. Ein wesentliche Restriktion bei der Auswahl der geeigneten Methode war, daß möglichst keine Rechnungen mehrmals durchgeführt werden sollten. Diese Einschränkung führte dazu, daß Standardverfahren, die darauf basieren, durch zusätzliche Berechnungen für kleinere Schrittweiten Vergleichswerte zu erzeugen, nicht geeignet sind. Auch Verfahren, die auf dem Lösen eines linearisierten Problems basieren, wären nur mit großem Aufwand realisierbar gewesen. Verwirklicht wurde daher eine Methode, die auf der Abschätzung der zeitlichen Gradienten beruht. Dieses heuristische Verfahren gehört in der Literatur zu den Standardmethoden und wird mit viel Erfolg angewendet. Eine zusätzliche Restriktion der Zeitschrittweite entsteht aus der gewählten Linearisierung einiger zeitabhängiger Koeffizienten. Hier werden nichtlineare Anteile durch Werte aus dem vorhergehenden Zeitschritt approximiert. Dies führt bei großen Änderungen innerhalb eines Zeitschritts zu unphysikalischen Ergebnissen. Um dies zu verhindern, war eine Erweiterung der Zeitschritt-

weitensteuerung notwendig. Das wurde durch einen zusätzlichen Term realisiert, der auf der Differenz der Nichtlinearitäten vom aktuellen zum vorhergehenden Zeitschritt (der zur Linearisierung benutzt wird) beruht. In numerischen Test hat sich gezeigt, daß diese Vorgehensweise sinnvoll ist und zu guten Ergebnissen führt. Zusätzlich zu diesen Arbeiten wurde recherchiert, ob in der Literatur geeignete Zeitdiskretisierungsverfahren zu finden sind. Letztlich wurde aber die implizite Eulermethode mit der heuristischen Zeitschrittsteuerung beibehalten.

5.3.3.2 Softwareentwicklung

Ein wesentlicher Teil der Arbeit bestand in der Entwicklung der Software. Die in Abschnitt 5.3.3.1 entwickelten Fehlerabschätzungen mußten in einen Algorithmus eingebunden werden und in das Programmpaket UG implementiert werden. Zu Projektbeginn lag eine sehr einfache Version eines Gitteradaptionsalgorithmus im Programmpaket vor, die als Vorlage benutzt werden konnte. Die wesentliche Entwicklungsarbeit wurden jedoch während der Projektlaufzeit geleistet.

Die entwickelten lokalen Fehlerindikatoren wurden implementiert. Es wurde ein Algorithmus erarbeitet, der aus den berechneten lokalen Indikatoren die Elemente für die Verfeinerung und Vergröberung auswählt. Die so ausgewählten Elemente werden dann in einem anderen Programmteil weiterverarbeitet. Der Gitteradaptionsalgorithmus ist so implementiert, daß er für alle vorkommenden Elementtypen benutzt werden kann: Dreiecke und Vierecke in 2D und Tetraeder, Prismen und Pyramiden in 3D. Eine Erweiterung auf andere Elementtypen ist jederzeit möglich.

Auch die Zeitschrittweitensteuerung mit einem passenden Algorithmus wurde in das Programm eingearbeitet. Die Implementierung der einzelnen Teile ist so gehalten, daß Erweiterungen durch neue Elementtypen und Indikatoren oder auch Modifikationen der Algorithmen schnell möglich sind. In einem zweiten Arbeitsschritt wurde das erstellte Programm neu strukturiert, um ein effizientes Arbeiten zu gewährleisten. Das Ergebnis ist ein Gitteradaptionsalgorithmus, der auf allen vorkommenden Elementtypen effizient arbeitet und gute Ergebnisse liefert.

5.3.3.3 Algorithmusuntersuchungen

Begleitend zur Implementierung wurden die neu entwickelten Programmteile an Standardbeispielen getestet. Hierbei wurde neben der Fehlerbeseitigung größter Wert auf die Untersuchung und Verbesserung der vorhandenen Algorithmen gelegt. Basierend auf Arbeiten von Bänsch [8] wurden unterschiedliche mögliche Algorithmen untersucht.

Insbesondere da die theoretischen Grundlagen nicht erschöpfend bewiesen werden konnten, war eine intensive Überprüfung der Leistungsfähigkeit des Algorithmus und der Fehlerindikatoren notwendig. Es wurden numerische Tests für Beispiele mit unterschiedlicher Komplexität durchgeführt. Diese Untersuchungen haben gezeigt, daß die aus dem entwickelten Fehlerschätzer resultierenden Indikatoren sehr gute Ergebnisse liefern. Auch für komplexe Probleme, z.B. mit unstetigen Koeffizienten, entsprechen die erhaltenen Gitter den zu erwartenden Ergebnissen. Vergleiche mit uniform verfeinerten Rechengittern mit wesentlich höherer Anzahl von Unbekannten haben gezeigt, daß mit den angepaßten Gittern gleiche Ergebnisse in kürzerer Zeit zu erhalten sind.

Ein besonderer Schwerpunkt lag bei den Testrechnungen auch darauf, eine einfache Handhabung des Algorithmus zu erreichen. Es wurden Voreinstellungen für die Steuerungsparameter gesetzt. Hier muß jedoch gesagt werden, daß nicht alle Parameter problemunabhängig voreingestellt werden können. Testreihen für die Zeitschrittweitensteuerung zeigten, daß das heuristische Verfahren gute Ergebnisse liefert. Auch im Fall der Linearisierung mit Werten aus dem vorhergehenden Zeitschritt konnten gute Ergebnisse erzielt werden.

Massenerhaltung

Einer der Ansprüche an die Software war, daß die Erhaltungsgleichungen erfüllt sind. Die Diskretisierung erfüllt diesen Anspruch. Durch die Gitteradaption kann es zu Fehlern in der zeitlich globalen Massenerhaltung kommen. Dies ist darauf zurückzuführen, daß bei einem Gitterwechsel die Daten auf ein neues Gitter interpoliert werden müssen. Es zeigt sich, daß durch Verfeinern der Gitter keine Fehler in der Massenbilanz auftreten, nur durch Vergröbern kann es zu Fehlern kommen. Als einfachstes Restriktionsverfahren werden die Werte auf die Knoten projiziert, die im gröberen Gitter die gleichen Koordinaten haben. Falls ein solcher Knoten nicht existiert, wird der Wert im weiteren ignoriert.

Dieses Verfahren erzeugt Fehler in der Massenbilanz. Es wurden weitere möglicher Verfahren erarbeitet, die geringere oder gar keine Fehler in der Massenbilanz erzeugen. Praktische Rechnungen haben gezeigt, daß die Fehler in der Massenbilanz die Lösung nur unwesentlich oder gar nicht verändern. Dies liegt unter anderem daran, daß die Massen nur dann nicht erhalten werden, wenn das Gebiet vergröbert wird. In den Bereichen, in denen vergröbert wird, sind die Änderungen in der Lösung relativ klein. Somit ist auch der Einfluß des Defektes in der Massenbilanz zu vernachlässigen.

Punkt- und linienförmige Quellen und Senken

Punkt- und linienförmigen Quellen und Senken kommt aus mehreren Gründen in der Gitteradaption eine Sonderbehandlung zu. Sie stellen Singularitäten in der Lösung dar. Die entwickelten Indikatoren sind für solche Aufgabenstellungen nur unzureichend geeignet. Singuläre Problemstellungen würden eine andere Theorie erfordern, die aber noch nicht hinreichend entwickelt ist. Um diese Schwierigkeit zu umgehen, werden die Quellen und Senken nicht als punkt- bzw. linienförmig angenommen, sondern durch Quellen und Senken mit geringer Ausdehnung approximiert. Dies stellt nur einen sehr kleinen Eingriff in die Berechnungen dar, da sichergestellt wird, daß die Ausdehnung einer Quelle oder Senke kleiner ist, als die kleinste mögliche Elementgröße, so daß die jeweiligen Finite-Volumen-Diskretisierungen identisch sind.

Solche Singularitäten führen dazu, daß die Lösung an Regularität verliert. Es ist zu erwarten, daß der Approximationsfehler in der Nähe einer Quelle oder Senke wesentlich höher ist als in dem restlichen Gebiet. Dies zeigen auch die praktischen Rechnungen. Aus mathematischer Sicht wäre es sinnvoll, nur in der Umgebung einer Quelle oder Senke ein feines Gitter und im Rest des Gebietes ein grobes Gitter zu haben. Aus praktischer Sicht ist man aber in der Regel nicht nur an dem Verhalten der Lösung nahe der Quelle interessiert, so daß der Algorithmus geeignet modifiziert werden mußte. Dabei werden die Elemente in der Nähe von Quellen oder Senken gesondert betrachtet. In der Regel werden diese Elemente so weit verfeinert, bis die maximale Gitterfeinheit erreicht ist. Der verbleibende Teil des Modellgebietes wird gesondert verfeinert oder vergröbert.

Interpolationsfehler in den Anfangsdaten

In den numerischen Untersuchungen hat sich gezeigt, daß ein Fehler in den Anfangsdaten sich auf den gesamten zeitlichen Verlauf der Rechnung auswirkt. Dies ist besonders

der Fall bei unstetigen Anfangsdaten. Eine Unstetigkeit in den Anfangsdaten kann von den “normalen” Fehlerindikatoren nicht erkannt werden. Aus diesem Grund mußte für solche Situationen eine zusätzlicher Indikator entwickelt werden. Um auch die Anfangdaten hinreichend gut zu interpolieren und mit einem angepaßten Startgitter die Rechnungen zu beginnen, wird vor Beginn der eigentlichen Rechnung ein Startschritt durchgeführt. In diesem Schritt wird unter anderem aus den vorgegebenen Anfangsdaten ein Startgitter entwickelt. Die Gitteradaption in diesem Schritt basiert auf dem lokalen Interpolationsfehler, der durch die Interpolation der Anfangsdaten auf das Gitter entsteht. An den Stellen, an denen der Interpolationsfehler groß ist, wird das Gitter verfeinert und die Anfangsdaten werden auf das modifizierte Gitter interpoliert. Auf diese Weise können auch unstetige Anfangsbedingungen hinreichend gut durch das Startgitter abgebildet werden, und der Fehler im Anfangsschritt bleibt verhältnismäßig klein.

5.3.3.4 Zusammenfassung

Während der Projektlaufzeit konnten große Fortschritte im Bereich der Fehlerschätzung und Gitteradaption für die gegebenen Modellgleichungen gemacht werden. Ein quantitativer Fehlerschätzer wurde entwickelt. Trotzdem ein komplexes, nichtlineares Problem vorlag, konnten Fehlerindikatoren zur Gitteradaption abgeleitet werden. Es wurde ein effizienter Algorithmus zur Gitteradaption entwickelt und implementiert. Auch wenn die theoretischen Grundlagen nicht bis ins letzte Detail geklärt sind, so ist doch ein solides Werkzeug entstanden, um komplexe Problemstellungen auf großen Modellgebieten zu berechnen.

Umfangreiche numerische Tests haben gezeigt, daß die entwickelten Fehlerindikatoren gut geeignet sind. Die Gitteradaption ermöglicht Berechnungen auf großen Gebieten, da die Gitterfeinheit in Teilbereichen grob gehalten werden kann. Auch im Bereich der Zeitschrittweitensteuerung konnte allen auftretenden Schwierigkeiten begegnet werden. Die implementierte Zeitschrittweitensteuerung hat gezeigt, daß sie auch bei komplexen Problemstellungen stabil arbeitet und gute Ergebnisse liefert.

5.3.4 Lösungsalgorithmen für Dichteströmungen

Die mathematische Modellierung von dichtegetriebenen Strömungen in porösen Medien führt bei Anwendung auf realistische Probleme zu sehr großen Gleichungssystemen. Diese Systeme können dabei durchaus $n = 10^6$ bis 10^7 Unbekannte haben. Die Komplexität der gesamten Simulation hängt daher im wesentlichen von dem zur Lösung dieser Gleichungssysteme verwendeten Ansatz ab. Da der Aufwand für Simulationsschritte, wie Assemblierung, adaptive Gitterverfeinerung etc. bei dünnbesetzten diskreten Operatoren sich typischerweise wie $O(n)$ verhält, ist die Komplexität des Gesamtverfahrens bestimmt durch diejenige des Lösungsverfahrens [65]. Daher sind bei sehr großem n nur Methoden aussichtsreich, die die optimale Komplexität $O(n)$ aufweisen, wie dies bei Mehrgitterverfahren der Fall ist [63], [170]. Zu diesem Zweck wurde ein Mehrgitterverfahren für die Differentialgleichungen der dichtegetriebenen Strömung im porösen Medium entwickelt. Die entwickelten Algorithmen bis auf die Grobgittergenerierung und das graphische Postprocessing mußten ferner eine Parallelisierung zulassen. Die Implementierung sollte sowohl auf seriellen Rechnern, Workstation-Netzen als auch auf Mehrprozessormaschinen mit bis zu einigen hundert Prozessoren lauffähig sein. Aufgrund der stark unterschiedlichen Kommunikationsleistungen dieser Rechner sollte die Granularität der Algorithmen in weiten Grenzen einstellbar sein.

Ziel war es, ein auf Parallelrechnern lauffähiges Programm zur Aufstellung und Lösung der diskretisierten Gleichungen für die Simulation dichtegetriebener Grundwasserströmungen zu erstellen. Dazu sollte ein effizienter, paralleler, adaptiver Löser entwickelt werden. Desweiteren sollte eine Benutzeroberfläche installiert werden, um eine effiziente Handhabbarkeit des Programms zu gewährleisten.

5.3.4.1 Effiziente Löser für Dichteströmungen

Bei den diskretisierten Gleichungen der dichtegetriebenen Grundwasserströmungen handelt es sich um ein nichtlinear gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen vom Konvektions-Diffusions-Typ [45], [47]. Typische Schwierigkeiten, denen bei der Entwicklung von Mehrgitterverfahren für diese Gleichungen Rechnung zu tragen ist, bestehen in der Heterogenität des Untergrundes, die zu stark variierenden Koeffizienten

führt, sowie im singulär gestörten Charakter der Gleichungen, der zwischen diffusions- und konvektionsdominiert wechseln kann. Weitere Schwierigkeiten liegen in der Nichtlinearität der Gleichungen, die zusätzliche nichtlineare Lösungsstrategien fordert, und in der Tatsache, daß es sich um ein System von Differentialgleichungen mit lokal durchaus unterschiedlichem Verhalten und nichtlinearer Kopplung handelt.

Zur Behandlung sind robuste Mehrgittermethoden erforderlich, deren Effizienz gegenüber den genannten Schwierigkeiten unempfindlich ist. Da starke Heterogenität und das Auftreten von wandernden Fronten und Konvektionswalzen die Verwendung unstrukturierter, adaptiv verfeinerter Gitter erforderlich macht, müssen die verwendeten Verfahren ebenfalls für solche Gitter geeignet sein. Ferner müssen die Algorithmen eine Parallelisierung zulassen.

Das Programmpaket UG

Das Programm wurde auf allen Ebenen modular organisiert. Die Wartung alter sowie die Integration neuer Module ist so in einfacher Weise möglich. Die Modularisierung erlaubte zudem eine transparente Parallelisierung des Programms. Es wurde ein Verfeinerungsalgorithmus implementiert, der Verfeinerung und Vergröberung erlaubt und bezüglich des Einbaus verschiedener Verfeinerungsregeln für unterschiedliche Elementtypen flexibel ist. Die modulare Struktur war die Grundvoraussetzung für eine effektive Zusammenarbeit zwischen den Teilprojekten. Programmteile, die außerhalb entwickelt wurden, konnten so effizient in die bestehende Struktur eingebunden werden.

Vorgehensweise

Zunächst wurde ein einfaches zweidimensionales Dichteströmungsmodell implementiert, um die grundlegenden Verfahrenskomponenten zu untersuchen. Die Implementierung umfaßte verschiedene Diskretisierungsverfahren auf der Basis knotenzentrierter, linearer Ansatzfunktionen. Als Lösungsverfahren wurde ein einfacher Newton-Löser mit einem linearen Mehrgitter-Löser implementiert. Zur Verifizierung wurden zunächst folgende Probleme gerechnet: eigene Testprobleme, das Elder-Problem und das Benard-Problem.

Die Funktionalität des Modells wurde sukzessive erweitert:

- strukturierte Gitter → unstrukturierte Gitter
- global verfeinern → lokal adaptive Verfeinerung/Vergröberung unter Verwendung des Fehlerschätzers (siehe Abschnitt 5.3.3)
- einfache Modellprobleme → realistische Testfälle
- 2D → 3D

Da die tatsächliche Effizienz stark implementierungsabhängig ist, wurde besonderes Gewicht auf eine gleichzeitig transparente und effiziente programmtechnische Umsetzung gelegt.

Entwicklung des Lösers

Wie einleitend bereits erwähnt, wurde das Programmpaket UG auf allen Ebenen modularisiert. Das Numerikmodul des Simulators stellt ein flexibles, modulares System von Löserkomponenten zur Verfügung. Diese Untermodule können nach einem Baukastenprinzip zu komplexen Algorithmen zusammengesetzt werden. Die einzelnen Untermodule sind Repräsentanten verschiedener Klassen, wie z.B. lineare Iteratoren, lineare Löser, nichtlineare Löser, Zeitintegrationsroutinen usw. Auf diese Weise sind klassische Mehrgitterverfahren, Newtonverfahren, die die linearen Teilprobleme mit Hilfe von Mehrgitterverfahren lösen, Zeitintegrationsverfahren, die wiederum solche nichtlinearen Löser verwenden, realisierbar. Zur Lösung der Gleichungen der dichtegetriebenen Grundwasserströmung kommt ein Lösungsverfahren folgender Struktur zum Einsatz:

- Zeitintegrationsverfahren
- Nichtlineare Löser
- Linearer Löser
- Glätter
- Grobgitterlöser

Zeitintegrationsverfahren

Zunächst wurde ein implizites Eulerverfahren implementiert. Dieses ist von erster Ordnung und erweist sich als stabil bei großen Zeitschritten. Für das voll implizite Schema gibt es keine Begrenzung für den Zeitschritt um Stabilität zu gewährleisten. Die erste Imp-

lementierung beinhaltete eine einfache Strategie zur Zeitschrittweitensteuerung. Bei guter Konvergenz wird der Zeitschritt verdoppelt, bei schlechter Konvergenz oder Divergenz wird der Zeitschritt halbiert. Die Entwicklung zeigte, daß die einfache Strategie zur Zeitschrittweitensteuerung für Langzeitsimulationen nicht effizient genug ist. Es wurde daraufhin eine konvergenzabhängige Steuerung implementiert, bei der sich der Zeitschritt mit der Wurzel des Quotienten aus der Anzahl der benötigten nichtlinearen Schritte und der optimalen Anzahl nichtlinearer Schritte multipliziert. Mit dieser Zeitschrittweitensteuerung wurden neben dem neuentwickelten Verfahren sehr gute Erfahrungen gemacht. Neben dem impliziten Eulerverfahren wurden noch zwei weitere Verfahren zweiter Ordnung untersucht, das Crank-Nicholson Verfahren mit konstanter Schrittweite und ein Zweischritt BDF-Verfahren (Backward Difference Formula) mit variabler Schrittweite. Diese erwiesen sich jedoch in der Anwendung auf die dichtegetriebene Grundwasserströmung als nicht hinreichend stabil.

Nichtlineare Löser

Die aus der Zeitdiskretisierung entstehenden Gleichungen werden voll gekoppelt gelöst. Die Hauptschwierigkeit liegt in der nichtlinearen Kopplung zwischen der Dispersion in der Stofftransportgleichung und der Strömungsgeschwindigkeit. Nichtlineare Probleme können mit dem Mehrgitterverfahren für lineare Probleme dadurch gelöst werden, daß man das Problem linearisiert und iterativ löst, z.B. durch ein Newton-Verfahren. Es muß sichergestellt werden, daß die Jacobi-Matrix des nichtlinearen Problems nicht singulär ist. Zur Lösung der Gleichungen der dichtegetriebenen Grundwasserströmung wurde ein Newton-Verfahren implementiert. Das nach jedem Iterationsschritt entstehende lineare Gleichungssystem wird dabei approximativ gelöst. Das Newton-Verfahren wurde in folgender Hinsicht optimiert:

- Liniensuche nach Braess
- Geschachtelte Iteration
- Lineare Steuerung
- Steuerung zur approximierten Linearisierung

Es wurde das Liniensuchverfahren nach Braess [26] implementiert. Hierbei wird der Dämpfungsparameter so gewählt, daß der Quotient der Defektnormen aus neuem zu altem Iterationsschritt monoton fällt. Eine Dämpfung des Newton-Verfahrens erweitert des-

sen Einzugsbereich. Bei Iterationsverfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungen kann es vom Startwert abhängen, ob die Iteration konvergiert. Ein Verfahren zur Berechnung der Startwerte ist die geschachtelte Iteration, die auf der Mehrgitter-Idee beruht. Mit Hilfe der geschachtelten Iteration lassen sich approximierte Startwerte durch Interpolation der Lösungen von gröberen Gittern berechnen. Es wurde eine an die nichtlineare Konvergenz angepaßte Steuerung des linearen Lösers entwickelt, die eine optimale lineare Reduktion gewährleistet. Dabei wurde das spezielle Verhalten des nichtlinearen Gleichungssystem berücksichtigt. Um den Aufwand des nichtlinearen Lösers zu minimieren, wurde ein Verfahren entwickelt, das eine Linearisierung aus dem nichtlinearen iterativen Prozeß als approximierte Jacobi-Matrix verwendet. Die Steuerung zur Anwendung dieses Verfahrens wurde an die nichtlineare Konvergenz angepaßt.

Neben dem Newton-Verfahren wurde ein nichtlineares Mehrgitterverfahren mit nichtlinearem Gauß-Seidel-Verfahren oder nichtlinearem symmetrischem Gauß-Seidel-Verfahren als Glätter implementiert. Beim nichtlinearen Mehrgitterverfahren wendet man das Mehrgitterverfahren direkt auf die gegebene nichtlineare Gleichung an. Die Rechnung setzt sich wieder aus Glättungsschritten und Grobgitter-Korrekturen zusammen. Vor allem letztere bekommen einen nichtlinearen Charakter. Das nichtlineare Mehrgitterverfahren unterscheidet sich vom linearen durch die Transformation der Grobgitter-Korrektur sowie des Glättungsverfahrens.

Eine Optimierung des Verfahrens, das auch eine Optimierung der Datenstruktur in UG für das nichtlineare Mehrgitter erfordert, konnte im Rahmen des Projekts nicht mehr durchgeführt werden. Bei bisher durchgeführten Modellrechnungen wurde ein deutlich höherer Aufwand als mit dem Newton-Verfahren festgestellt.

Linearer Löser

Das aus dem Newton-Verfahren entstehende lineare Gleichungssystem wurde mit dem klassischen Mehrgitterverfahren gelöst. Die Grobgittermatrizen erhält man durch Diskretisierung der Gleichungen auf den jeweiligen Gitterebenen. Eine matrixabhängige Prolongation/Restriktion findet beim algebraischen Mehrgitter zur Lösung der Grobgittermatrizen Anwendung.

Zur Beschleunigung des linearen Mehrgitters wurden mehrere Verfahren untersucht. Es wurden Tests mit dem Verfahren der konjugierten Gradienten (CG) und damit verwandten Verfahren, wie dem verallgemeinerten Verfahren der minimalen Residuen (GMRES), dem bi-konjugierten Gradienten Verfahren (BiCG) und einer stabilisierten Version (BiCG-Stab), durchgeführt. Sie dienen sowohl der Beschleunigung als auch zur Konstruktion alternativer robuster Mehrgitterverfahren.

Das konjugierte Gradienten Verfahren wurde 1952 von M. R. Hestenes und E. Stiefel [150] entwickelt. Es wurde ursprünglich als exakter Gleichungslöser für symmetrisch-positiv-definite Matrizen konzipiert. Für praktische Anwendungen ist es aufgrund von Rundungsfehlern als exakter Löser jedoch nicht geeignet. Später zeigte sich jedoch, daß es als iteratives Verfahren ein sehr effizientes Verfahren sein kann. Der Nachteil des CG-Verfahrens ist, daß es nur auf symmetrische Matrizen angewandt werden kann. Stabilität des Verfahrens ist sogar nur für symmetrische positiv-definite Matrizen gewährleistet. Es wurden nun verschiedene Anstrengungen unternommen, die verschiedenen Nachteile zu beseitigen. Das BiCG-Verfahren wurde entwickelt [49], [94], welches auch auf unsymmetrische Probleme angewandt werden kann. Bei spezieller Konfiguration fällt das BiCG-Verfahren mit dem konjugierten Gradienten Verfahren zusammen. Bei Vorkonditionierung des BiCG-Verfahren muß neben dem Vorkonditionierer auch die Transponierte bekannt sein. Dies ist im Falle eines Mehrgitterverfahrens für unsymmetrische Probleme nicht ohne Schwierigkeiten möglich. Eine Weiterentwicklung des BiCG- zum CGS-Verfahren (Conjugate Gradient Squared), das letzteren Nachteil vermeidet, stammt von P. Sonnevelt [148]. Das Verfahren konvergiert (oder divergiert) im allgemeinen doppelt so schnell wie das BiCG-Verfahren. Eine stabilisierte Variante namens BiCGStab wurde von H. A. van der Vorst entwickelt [165]. Der resultierende Algorithmus verhält sich stabiler als das CGS, bei etwa gleicher Konvergenzgeschwindigkeit. Der Vorteil der CGS, auf die adjungierte Matrix verzichten zu können, bleibt erhalten. Damit ist es möglich, das Bi-CGStab-Verfahren mit einem unsymmetrischen Mehrgitterverfahren vorzukonditionieren. Zur Lösung der diskretisierten Gleichungen der Grundwasserströmungen hat sich die stabilisierte Variante des BiCG, das BiCGStab-Verfahren, mit einem linearen Mehrgitterverfahren als Vorkonditionierer am stabilsten erwiesen.

Glätter

Das lineare Mehrgitterverfahren verwendet verschiedene Iterationsverfahren als Glätter. In dem Numerik-Modul des Programmpakets UG sind alle klassischen Iterationsverfahren implementiert. Als Glätter eignen sich für die hier betrachteten Gleichungen vor allem das Gauß-Seidel-Verfahren, das symmetrische Gauß-Seidel-Verfahren oder das ILU_β-Verfahren, eine Variante des ILU. Bei Verwendung dieser Verfahren werden die Knoten der verschiedenen Gitter lexikographisch angeordnet.

Neben der lexikographischen Anordnung der Knoten wurden verschiedene strömungsabhängige Anordnungsstrategien für die Unbekannten untersucht. Außerdem wurde ein einfacher, auf die Anordnungsstrategien abgestimmter Schurkomplement-Glätter implementiert. Die strömungsabhängige Anordnungsstrategie findet ihre Anwendung bei extrem konvektionsdominanten Strömungen. Dies ist bei den realistischen Problemen der dichtegetriebenen Grundwasserströmungen nicht der Fall, so daß auf die Anwendung dieser Strategie verzichtet wird.

Grobgitterlöser

Bei kleinen Grobgittermatrizen findet als Grobgitterlöser eine exakte LU-Zerlegung Anwendung. Für die Lösung der großen Grobgittermatrizen wurden zwei Strategien verfolgt:

- optimaler exakter Löser mit Bandbreitenoptimierung
- algebraisches Mehrgitter nach Ruge-Stüben

Das algebraische Mehrgitter basiert auf algebraischem Gittertransfer sowie einer Galerkin-Approximation der Gleichungssysteme. Die Untersuchung an Modellproblemen zeigte, daß große Grobgittermatrizen nur mit dem algebraischen Mehrgitterverfahren effizient lösbar sind. Da ein Einsatz als Black-Box-Verfahren für die vielschichtigen Probleme nicht erreicht wurde, wurden entsprechende Parameter zur Einstellung des algebraischen Mehrgitters konfigurierbar gemacht.

Optimierung der Approximationseigenschaft

Eine Optimierung der Approximationseigenschaft für die Gleichungen konnte durch folgende Strategien erreicht werden:

- Hierarchischer Abgleich der Randbedingungen
- Geeignete Wahl der approximierten Inversen auf gröberen Gittern (Galerkin-Diskretisierung)

Die Konvektions-Diffusions Gleichung

Parallel zur Entwicklung eines effizienten Lösers für Dichteströmungen wurde ein robuster Löser auf der Basis einer zweidimensionalen Konvektions-Diffusions Gleichung entwickelt. Bei dieser Gleichung handelt es sich um den gleichen Typ wie bei den diskretisierten Gleichungen der Dichteströmung. Der robuste Löser basiert auf Mehrgitterverfahren für den diffusiven und Anordnungsstrategien für den konvektiven Anteil. Die bei dieser Entwicklung gewonnenen Erfahrungen wurden auf das Dichteströmungsmodell übertragen. Der robuste Löser für die zwei-dimensionale Konvektions-Diffusions Gleichung basierte bei Abschluß der Entwicklung auf einem anordnungsbasiertem Glätter mit BiCG-Stab-Beschleunigung und einer verbesserten Grobgitter-Korrektur.

5.3.4.2 Die Behandlung der Dispersion

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der (anisotropen) Dispersion ist eine der komplexen Eigenschaften der Simulation von dichtegetriebenen Grundwasserströmungen. Dies wurde durch Testrechnungen während der Entwicklungszeit des Programmpakets bestätigt. Ziel der analytischen Linearisierung war es, alle Nichtlinearitäten zu berücksichtigen und in ihrer ursprünglichen Form zu betrachten. Die Dispersion wurde demnach aus den aktuell bekannten Geschwindigkeiten entwickelt, und die Abhängigkeit wurde in die analytische Linearisierung einbezogen (implizite Behandlung). Tests zeigten, daß solche Rechnungen möglich sind. Da jedoch das dynamische Verhalten der Geschwindigkeit während einer Simulation sehr komplex ist, benötigt das voll-implizite Verfahren im allgemeinen reduzierte Zeitschritte. Um diesen Nachteil zu beheben, wurde eine weitere Strategie implementiert. Dabei wird die Dispersion explizit betrachtet, d.h. die Geschwindigkeit wird aus den Werten der Unbekannten des alten Zeitschritts bestimmt. Diese Strategie besitzt neben hinreichender Stabilität auch bei großen Zeitschritten ein wesentlich verbessertes Konvergenzverhalten. Wie alle explizite Verfahren hat auch diese Strategie Nachteile. Bei zeitlich starken Schwankungen der Geschwindigkeiten wird zur Lösung der Gleichungen eine nicht korrespondierende Dispersion verwendet. Zu große Zeit-

schritte führen zu lokalen Instabilitäten. Dies tritt nicht mehr auf, wenn adäquate Zeitschritte benutzt werden, wie sie vom Fehlerschätzer vorgeschlagen werden. Dieser wurde auf diese Problematik hin abgestimmt.

5.3.4.3 Aligned Finite Volumen

Das Aligned-Finite-Volumen-Verfahren ist eine Modifikation der Finiten Volumen. Es wurden speziell zur Diskretisierung konvektionsbehafteter Probleme entwickelt. Es ermöglicht die Konstruktion eines robusten Glätters für die Konvektions-Diffusions-Gleichung und die diskretisierten Gleichungen der Grundwasserströmung.

In einem triangulierten Gitter wird jedes Dreieck in drei abgeschlossene Teilmengen, die Teilkontrollvolumina, zerlegt. Die Idee war es, die Ränder der Teilkontrollvolumina, die innerhalb eines Dreiecks liegen, möglichst optimal an der Konvektion auszurichten. Die Idee zu diesem Verfahren wurde gleichzeitig von Bastian [11] und von Angermann [4] entwickelt und von Johannsen [79], [80] auf den dreidimensionalen Fall erweitert.

Jedem Dreieck wird dabei eine Geschwindigkeit zugeordnet. Im Falle der Konvektions-Diffusions-Gleichung wäre dieses z.B. die Konvektionsgeschwindigkeit im Schwerpunkt des Dreiecks. Im Falle einer Grundwasserströmung wäre dies z.B. die Darcy-Geschwindigkeit. Je nach Lage des Dreiecks relativ zur Richtung der Geschwindigkeit müssen in der Konstruktion drei Fälle unterschieden werden. Das auf diese Weise konstruierte Gitter bezeichnet man als ausgerichtetes Gitter. Auf folgende Eigenschaften der ausgerichteten Finite-Volumen sei besonders hingewiesen:

- Reduktion der numerischen Querdiffusion
- bessere Matrixeigenschaften durch reduzierten Matrix-Stern

Aufgrund dieser Eigenschaften kann neben einer verbesserten Approximation ein günstigeres Lösungsverhalten erzielt werden. In speziellen Fällen führen die Aligned-Finite-Volumen auf eine Zweipunkt-Diskretisierung, die eine Konstruktion eines robusten Glätters auf der Basis von Gauß-Seidel-artigen Verfahren unter Umständen erst ermöglicht.

5.3.5 Parallelisierung adaptiver Mehrgitterverfahren

Im Rahmen der Aufgabenstellung des Projekts sollten alle Komponenten des Simulators bis auf die Grobgittergenerierung und das graphische Postprozessing parallelisiert werden. Für die Komponenten Diskretisierung und Fehlerschätzer ist dies problemlos möglich, während sowohl dynamische Lastmigration und parallele Gitteradaption einen hohen Entwicklungsaufwand erfordern. Die Parallelisierung robuster Mehrgitterverfahren erfordert eine besondere Behandlung der Kopplungsränder der Teilgebiete, um ein numerisch konsistentes Lösungsverfahren zu erhalten. Eine hohe parallele Effizienz wird durch Minimierung des Verhältnisses von Kommunikations- zu Rechenzeit erreicht. Dazu ist die Zuordnung möglichst zusammenhängender, gleich großer Teilgebiete zu den Prozessoren notwendig. Da die Position der Gitterverfeinerung a priori nicht bekannt ist, ist ein dynamischer Lastausgleich zwischen den Prozessoren erforderlich. Bei der Implementierung erforderte insbesondere die dynamische, verteilte Verwaltung der komplexen Datenstruktur - welche sowohl bei Lastmigration als auch bei Gitterveränderungen erforderlich ist - ein sorgfältiges Softwaredesign mit einer sich daran anschließenden umfangreichen Testphase.

Befaßt man sich mit paralleler Hardware, findet man verschiedene Rechnerarchitekturen vor. Eine Betrachtungsweise, parallele Rechnerarchitekturen zu klassifizieren, ist die Unterscheidung nach der Art, wie die Prozessoren auf den Speicher zugreifen [76].

- Im shared-memory Modell haben alle Prozessoren Zugriff auf einen gemeinsamen Speicher. Die Kommunikation und Synchronisation zwischen den Prozessoren erfolgt durch Speicheroperationen. Normalerweise sind der gemeinsame Speicher und die Netzwerkknoten physikalisch getrennt. Dieses Modell erfordert wenig Programmieraufwand, ist jedoch begrenzt in der Skalierung.
- Im distributed-memory Modell hat jeder Prozessor seinen eigenen Speicher auf den die anderen Prozessoren nicht direkt zugreifen können. Die Kommunikation und Synchronisation erfolgt durch den Austausch von Nachrichten, die über ein Verbindungsnetzwerk gesendet werden. Dieses Modell ist schwieriger zu verwenden als das shared-memory Modell, jedoch bei richtiger Anwendung erhält man eine Skalierung ohne Performanceverlust.

Wir unterscheiden also speichergekoppelte und nachrichtengekoppelte Rechner. Die d^{3}f Anwendung basiert auf dem distributed-memory Konzept, da es ohne viel Aufwand möglich ist diese Anwendung auf das shared memory zu übertragen. Für den Nachrichtenaustausch zwischen den Prozessoren wurde eine maschinenunabhängige Schnittstelle PPIF (Parallel Processing Interface) entwickelt. Diese wurde für eine Vielzahl von Parallelrechnern mit der schnellsten, herstellereigenen Software implementiert (Parsytec PARIX, Intel Paragon, Cray T3E). Außerdem stehen Implementierungen in den portablen Schnittstellen PVM und MPI (message-passing interface) zur Verfügung.

In der d^{3}f Anwendung setzt das PPIF auf einem SPMD-Programmiermodell (single program over multiple data streams) auf, d.h. jeder Prozessor führt den gleichen Programmcode aus, durch Auswertung der Prozessornummer können aber verschiedene Zweige durchlaufen werden. Das SPMD-Programmiermodell ist in natürlicher Weise für numerische Anwendungen geeignet. Neben Speicherplatzgründen verwendet man Parallelrechner zur Beschleunigung der Simulation. Als Maß der Effizienz eines parallelen Programms werden verschiedene Parameter herangezogen. Um die Performance bei der Benutzung eines parallelen Programms zu messen, vergleicht man die sequentielle Rechenzeit eines Simulationsproblems mit der Rechenzeit auf *P* Prozessoren. Dieser Faktor $S_X^f(P)$ wird Beschleunigung (speedup) genannt und ist gegeben durch

$$S_X^f(P) = \frac{T_X(1)}{T_X(P)}. \qquad (5.48)$$

Dabei ist $T_X(P)$ die Ausführungszeit, die benötigt wird, um das Problem X auf P Prozessoren zu rechnen [76]. Ein weiteres Maß ist die parallele Effizienz. Um Parallelrechner effizient zu benutzen, muß die Anzahl der Prozessoren an die Problemgröße angepaßt werden. Die parallele Effizienz $S_X^S(p)$ ist definiert durch

$$S_X^S(p) = \frac{P \cdot T_X(1)}{T_{P \cdot X}(P)}, \qquad (5.49)$$

Dabei ist $T_{P \cdot X}(P)$ die Zeit, die benötigt wird, ein Problem, das P mal so groß ist wie das Problem X auf P Prozessoren, zu berechnen. Beide Faktoren, Beschleunigung und parallele Effizienz, zeigen optimale Performance, falls keine sequentiellen Anteile (bottlenecks) im Programmcode verbleiben und die Last auf alle Prozessoren gleichmäßig verteilt ist. Der Prozeß zur Bestimmung des Lastausgleichs wird Lastverteilung genannt. Lastverteilung und die eigentliche Lastmigration sind Teil des Gesamtverfahrens, deren Zeitbedarf in einem ausgewogenem Verhältnis zur erzielten Effizienz im Assemblierungs- und Lösungsschritt stehen muß.

5.3.5.1 Konzept für die Parallelisierung

Der natürliche und direkte Weg vom sequentiellen zum parallelen Rechnen ist, die Daten, auf der eine Simulation arbeitet, zu verteilen. Dies wurde in diesem Projekt so realisiert, daß das Mehrgitter in Gebiete aufgeteilt wird und jeder Prozessor dann auf den Mehrgitterobjekten des ihm zugeteilten Gebiets arbeitet [95]. Die Datenaufteilung des Mehrgitters erfolgt mit der Überlappungstiefe 1 über die Elementnachbarschaften innerhalb einer Gitterebene (horizontale Überlappung) und den Vater-Sohn Beziehungen zwischen den Gitterebenen (vertikale Überlappung). Die Überlappung von Elementen stellt folgende Eigenschaften sicher:

- Die Verbindung zwischen den Elementen wird verteilt repräsentiert, es gehen keine Nachbarschaften verloren.
- Fehlerschätzer und Defektberechnung können lokal ohne Kommunikation durchgeführt werden.

Um obiges Konzept zur Verteilung der Daten für parallele numerische Rechnungen zu realisieren, mußten folgende Probleme angegangen werden:

- Eine geeignete Datenverteilung muß bestimmt werden (Lastverteilung).
- Es muß ein Mechanismus existieren, der es erlaubt Mehrgitterobjekte auf die Prozessoren zu verschieben (Lastmigration).

- Es müssen Kommunikationen stattfinden, die sicherstellen, daß der numerische Algorithmus richtig abläuft. Diese Kommunikationen sorgen für die Konsistenz der parallel berechneten numerischen Werte.

Zunächst wurde die parallele, dynamische Verwaltung der Datenstruktur überarbeitet. Mit Abschluß dieser Arbeit deckt die Funktionalität des Gitterverwaltungmoduls alle Bedürfnisse ab, die bei der Parallelisierung entstehen.

Es wurde dafür die Funktionalität des parallelen Gittermanagers erweitert. Ein Grobgitter kann auf einem Prozessor eingelesen werden und konsistent auf beliebig viele Prozessoren verteilt werden. Im weiteren Berechnungsverlauf kann das Gitter den Lösungseigenschaften entsprechend parallel adaptiert und bei ungünstigen Lastzuständen neu verteilt werden.

5.3.5.2 Lastverteilung

Die Aufgabe der Lastverteilung ist es, die Rechenleistung zwischen allen Prozessoren, die für die Simulation verwendet werden, auszugleichen. Unausgeglichene Verteilung bedeutet einen Verlust an Rechenzeit. Die Last ist gegeben durch die Arbeit in jedem Zeitschritt der parallelen Simulation: Assemblierung, Lösen, Fehlerschätzung, Gitteradaption und der Lastausgleich selbst. Im Rahmen des Projekts wurde eine elementbasierte Verteilung implementiert, da die elementbasierten Schritte (Assemblierung, Fehlerschätzer, Gitteradaption) die Knoten/Vektor zentrierten Schritte im Lösungsschritt überwiegen. Dies wurde mit Hilfe eines graphenbasierten Konzepts realisiert. Hierbei müssen folgende Punkte optimiert werden, die die Qualität der Lastverteilung beeinflussen:

- Lastgleichheit zwischen den Prozessoren
- Aufwand der horizontalen Kommunikation während des Glättungsschrittes
- Aufwand der vertikalen Kommunikation, wenn der Defekt aufsummiert wird

In der Praxis können diese Bedingungen nicht direkt minimiert werden. Es wurden jedoch verschiedene Anstrengungen unternommen, um das Problem einer guten Elementverteilung zu bewältigen. Eine einfache Strategie ist die Rekursive Koordinaten Bisektion (RCB), die auch in d^3f Anwendung findet.

5.3.5.3 Lastmigration

Eine neue Lastverteilung findet statt, wenn dies durch das Schema der Lastverteilung bestimmt wird, d.h. alle Elemente des Mehrgitters erhalten dann die Information über den Prozessor dem sie zugeteilt werden. Die verbleibende Aufgabe war dann, die Elemente und die abhängigen Datenobjekte auf ihr neues Ziel zu übertragen. Aufgrund der Flexibilität der implementierten Datenstruktur war dies eine hochkomplexe Aufgabe. In den Prozeß der Lastmigration werden alle Prozessoren einbezogen. Er erfordert das Löschen von alten horizontalen und vertikalen Überlappungsgebieten sowie das Erstellen neuer Überlappungsgebiete. Für das Löschen der Überlappungsgebiete wurde eine Löschhierarchie implementiert.

Die Realisierung der Lastmigration auf Ebene der Nachrichtenübertragung (PPIF), würde zu einer parallelen Software führen, die schwierig zu entwickeln und zu warten ist. Aus diesem Grunde wurden neue Programmiermodelle entwickelt, die die Funktionalität des Verteilens von Datenobjekten zwischen lokalen Speichern von Parallelrechnern unterstützen. Für die Anwendung des d^3f erwies sich das DDD (Dynamic Distributed Data) als geeignetes Modell [21], [20]. Die Mehrgitterstruktur des d^3f wurde an das Schema der verteilten Graphen angepaßt. Das DDD minimiert außerdem das Volumen des Datentransfers zwischen den Prozessoren und die Anzahl der Nachrichtenübertragungen.

5.3.5.4 Transparenz

Während der Entwicklung des parallelen Programmcodes des d^3f war es das Ziel, dem Anwender die gleiche Arbeitsumgebung und Funktionalität wie in der seriellen Version zu gewährleisten. Dieses Ziel konnte in vollem Maße erreicht werden, was zu einem parallelen Code führte, bei dem die Parallelisierung für den Anwender verborgen bleibt, und somit eine einfache Bedienung ermöglicht.

5.3.5.5 Der Verfeinerungsalgorithmus

Lokal verfeinert nennen wir ein Mehrgitter, das auf verfeinerten Gitterebenen neue Freiheitsgrade nur noch in den lokal verfeinerten Regionen speichert und bearbeitet. Es werden keine Kopien der Gitter außerhalb dieser Regionen angelegt. Auf diese Weise erhält man auch bei starker lokaler Verfeinerung ein optimal komplexes Verfahren [10].

Die bestehenden Algorithmen zur Handhabung von allgemeinen geometrischen Elementen (allg. Element-Konzept) wurden überarbeitet. Die 3D-Elemente (vorher nur Tetraeder) wurden erweitert. Es sind jetzt auch Hexaeder und (eingeschränkt auf Abschlußelemente) Pyramiden und Prismen verfügbar. Für die neuen Elementtypen wurden die wichtigen Verwaltungsfunktionen (Create, Dispose, Connect, ...) implementiert. Ferner wurde eine Adaptionsstrategie auf der Basis eines allgemeinen Element-Konzepts konzipiert und implementiert.

Der Verfeinerungsalgorithmus wurde für zwei und drei Raumdimensionen für die Fälle uniformer und adaptiver Verfeinerung parallelisiert. Die Realisierung der Lastmigration zwischen den Prozessoren war als Vorarbeit notwendig, um nach der Gitteradaption weiterhin effizient parallel rechnen zu können. Die Gitteradaption stellt seriell wie parallel die Konsistenzeigenschaft des lokalen Mehrgitters sicher.

5.3.6 Zufallsgenerator für stochastische Modellierungen der Permeabilität

Physikalische, ortsabhängige Eigenschaften des Aquifers werden im Programmpaket d^{3}f im allgemeinen schichtweise angegeben, wobei innerhalb der Schicht die Eigenschaft eine Konstante oder eine einfache Funktion der Orts- und Zeitkoordinaten sein kann, die noch über eine Parameterliste spezifiziert werden kann. Doch für die Permeabilität, die zentrale Größe bei der Grundwassermodellierung, werden große Variationen beobachtet. Gleichzeitig ist eine Vermessung dieser Größe nur eingeschränkt möglich. Dieses Problem wird zum einen durch die Annahme einer homogenen Permeabilität mit einem wahrscheinlichen Mittelwert der Permeabilität umgangen, als auch durch sogenannte Monte-Carlo- oder Multirealisationsrechnungen. Um im Programmpaket d^{3}f auch beide Möglichkeiten einfach realisieren zu können, wurde ein Zufallsgenerator in das Programm eingebaut, dessen Zufallsfeld alternativ zu den einfachen Funktionen oder den Konstanten als Permeabilitätsverteilung genutzt werden kann. Dieser Generator orientiert sich an dem in [129] vorgestellten Generator `fgen`. Beide Generatoren nutzen die Entkopplung der Frequenzen der Fouriertransformierten der Autokorrelationsfunktion. Dementsprechend können im Fourierraum für unterschiedliche Frequenzen statistisch unabhängige, normalverteilte, komplexe Zufallswerte mit Mittelwert und Varianz in Abhängigkeit von der Frequenz und der Autokorrelationsfunktion bestimmt werden und die rücktransformierte Verteilung ist eine Realisation der gewünschten Statistik.

Sei $H(\boldsymbol{x})$ ein normalverteiltes Zufallsfeld mit Mittelwert 0 und Varianz 1, und bezeichne

$$\hat{H}(\boldsymbol{k}) = \int_{R^n} e^{-2\pi i \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{k}} H(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \qquad (5.50)$$

die Fouriertransformierte. Die Fouriertransformation läßt sich invertieren durch

$$H(\boldsymbol{x}) = \int_{R^n} e^{2\pi i \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{k}} \hat{H}(\boldsymbol{k})\, d\boldsymbol{k}. \qquad (5.51)$$

Mit dem Skalarprodukt

$$(\hat{H},\ \hat{G}) \quad = \quad \int_{R^n} H(\boldsymbol{x})\overline{G(\boldsymbol{x})}\,d\boldsymbol{x} \qquad (5.52)$$

gilt die Identität von Plancherel

$$(\hat{H},\ \hat{G}) \quad = \quad (H,\ G) \qquad (5.53)$$

Weiterhin bezeichne

$$C(\boldsymbol{x}) \quad = \quad (H * H)(\boldsymbol{x}) \equiv \int_{R^n} H(\tau)H(\tau + \boldsymbol{x})\,d\tau \qquad (5.54)$$

die Faltung von H mit sich selbst. Unter den obigen Annahmen an H ist C die Autokorrelationsfunktion von H. Es gilt

$$\hat{C}(\boldsymbol{k}) \quad = \quad \hat{H}(\boldsymbol{k}) \cdot \hat{H}(\boldsymbol{k}). \qquad (5.55)$$

Dieses bedeutet, daß das zweite Moment der Fourierkomponenten des Zufallsfeldes die Fouriertransformierte der Autokorrelationsfunktion ist. Wegen der Umformung

$$\int H(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x} \quad = \quad \int (H(\boldsymbol{x}) \cdot 1)\,d\boldsymbol{x} \quad = \quad 0$$

gilt gemäß der Identität von Plancherel (5.53) die Gleichung

$$\hat{H}(0) \quad = \quad (\hat{H},\ \delta) \quad = \quad 0,$$

d.h. $\hat{H}$ hat an der Stelle $\boldsymbol{k}$ = 0 eine Nullstelle. Die Gleichung (5.55) läßt sich umgekehrt nutzen, um ein Feld mit der Autokorrelationsfunktion $C(\boldsymbol{x})$ zu generieren. Sei jetzt $G(\boldsymbol{k})$ eine Realisation eines Zufallsprozesses, bei dem die Autokorrelation verschwindet, und sei der Erwartungswert von G für jede Frequenz Null

$$E[G(\boldsymbol{k})] \;=\; E[(G,\ \delta_{\boldsymbol{k}})] \;=\; 0 \qquad (5.56)$$

und der Erwartungswert des Quadrates von G die transformierte Autokorrelationsfunktion:

$$E[G(\boldsymbol{k})G(\boldsymbol{k})] \;=\; \hat{C}(\boldsymbol{k}). \qquad (5.57)$$

Weiterhin bezeichne

$$H(\boldsymbol{x}) \;:=\; \int_{R^n} e^{2\pi i \boldsymbol{x}\,\cdot\,\boldsymbol{k}} G(\boldsymbol{k})\,d\boldsymbol{k} \qquad (5.58)$$

die Rücktransformierte von G und schließlich sei

$$G(-\boldsymbol{k}) \;=\; \overline{G(\boldsymbol{k})}. \qquad (5.59)$$

Dann ist $H(\boldsymbol{x}) \in R^n$, und es gilt aufgrund der Eindeutigkeit der inversen Fouriertransformation gemäß Gleichung (5.56)

$$E[(H,\ e^{2\pi i \boldsymbol{x}\,\cdot\,\boldsymbol{k}})] \;=\; 0 \text{ für alle } \boldsymbol{k} \in R^n \qquad (5.60)$$

und gemäß Gleichung (5.57)

$$E[H * H] \;=\; C(\boldsymbol{x}). \qquad (5.61)$$

D.h. wegen der Gleichung (5.60) für $\boldsymbol{k} = 0$ ist H ein Zufallsfeld mit Mittelwert 0, und die Gleichung (5.61) zeigt, daß die Varianz 1 und Autokorrelationsfunktion C ist. Die Gleichung (5.60) für beliebige $\boldsymbol{k} \in R^n$ zeigt die Stationarität des Zufallsprozesses. Die Eigenschaften (5.60) und (5.61) werden ausgenutzt, um aus unkorrelierten normalverteilten Zufallszahlen ein Zufallsfeld mit der gewünschten Korrelationsstruktur $C(\boldsymbol{x})$ zu gewinnen. Der R^n wird durch ein regelmäßiges Gitter mit Gittervektoren $\boldsymbol{e}_i \parallel x_i$-Achse, $i \in \{1, \ldots, n\}$ auf einem Rechteck bzw. Quader der Ausdehnung $l \cdot \ldots \cdot l$ ap-

proximiert. Jedem Punkt des zugehörigen Fouriergitters wird eine Zufallszahl $G_d(\boldsymbol{k})$ mit Erwartungswert Null und Erwartungswert des Quadrates $\hat{C}(\boldsymbol{k})$ zugeordnet. Zu dieser Gitterfunktion G_d wird die inverse diskrete fouriertransformierte Gitterfunktion

$$H_d(\boldsymbol{x}) \quad = \quad \sum_{\boldsymbol{k}} e^{2\pi i \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{k}} G_d(\boldsymbol{k}) \qquad (5.62)$$

berechnet. Durch periodische Fortsetzung und *n*-lineare Interpolation zwischen den Gitterpunkten wird H_d zu einer Funktion auf dem R_n erweitert. Für diese Fortsetzung gilt

$$\lim_{\substack{l_i \to \infty \\ \boldsymbol{e}_i \to 0}} E[H_d] \quad = \quad 0 \qquad (5.63)$$

und

$$\lim_{\substack{l_i \to \infty \\ \boldsymbol{e}_i \to 0}} E[H_d * H_d] \quad = \quad C(\boldsymbol{x}). \qquad (5.64)$$

D.h. das diskrete Zufallsfeld ist eine gute Approximation für eine Realisation des gewünschten Zufallsfeldes, wenn die Ausdehnung des Referenzrechteckes bzw. -quaders groß gegen die Korrelationsstruktur und die Gitterabstände des diskreten Gitters klein gegen die Korrelationsstruktur sind. Abschätzungen des Approximationsfehlers und Beispiele finden sich in [129].

Im Programmpaket d^{3}f wurde entsprechend der gerade skizzierten Theorie ein Zufallsfeldgenerator implementiert, der für exponentielle

$$C(\boldsymbol{x}) \quad = \quad e^{-\sum \frac{|\boldsymbol{x}_i|}{\lambda_i}} \qquad (5.65)$$

oder glockenförmige

$$C(\boldsymbol{x}) \quad = \quad e^{-\sum \frac{|\boldsymbol{x}_i|^2}{\lambda_i^2}} \qquad (5.66)$$

Korrelationsfunktionen auf Referenzgittern mit $\frac{l_i}{|\boldsymbol{e}_i|} \quad = \quad 2^p$ entsprechende Realisationen erzeugt. Für die diskrete Fouriertransformation wird die schnelle Fouriertransformation (FFT) verwendet; daraus folgt auch die Einschränkung auf Zweierpotenzen als Knotenzahl. Zufallsfelder mit Mittelwert ungleich Null und/oder Varianz ungleich Eins werden durch lineare Transformation der auf R^n fortgesetzten Gitterfunktion $H_d(\boldsymbol{x})$ gewonnen. Die Erzeugung der normalverteilten, unkorrelierten Zufallswerte im Fourierraum geschieht durch einen auf modulo-Berechnung basierenden Generator für gleichverteilte natürliche Zahlen in einem endlichen Zahlenbereich und geeigneter Transformation von mehreren dieser Zufallszahlen zu einer normalverteilten reellen Zahl. Der ganze Algorithmus ist deterministisch und kann durch einen Integer-Wert initialisiert werden. Anderenfalls wird dieser Startwert aus der Zeitvariablen genommen, und die Realisation ist in Unkenntnis dieses Wertes nicht reproduzierbar. Beispielfelder, die mit diesem Generator produziert wurden, befinden sich im Kapitel 8.

5.3.7 Singuläre Quellen und Senken

Im Programmpaket d^{3}f wird die Problemstellung unabhängig von einem Gitter für die Numerik repräsentiert. Dazu wird das Modellgebiet in Untereinheiten, sogenannte Subdomains zerlegt, die durch ihre Oberflächen definiert werden. Die meisten Eigenschaften des Aquifers sind unabhängig vom Ort oder orientieren sich an den geologischen Schichten, die durch diese Subdomains aufgelöst werden. Brunnen zur Zugabe oder Entnahme von Wasser und/oder Lauge hingegen orientieren sich nicht an diesen geometrischen Vorgaben und sind zu klein, um als eigene Untereinheit repräsentiert zu werden. Im Normalfall sind sie so klein, daß eine Approximation als Punkt oder Linie angebracht ist. Nun wird während der Diskretisierung der Differentialgleichung die entsprechende Quellstärke element- (genauer subkontrollvolumen-)weise benötigt, und das auch bei adaptivem Gitterumbau durch Verfeinerung und Vergröberung und einer Umverteilung der Elemente

zwischen den Prozessoren eines Parallelrechners. Weil die Diskretisierung bei nichtlinearen Problemen, wie den Differentialgleichungen (4.2) und (4.3), sehr häufig aufgerufen wird und einen beträchtlichen Teil der Rechenzeit verbraucht, wurde ein schneller Algorithmus benötigt, der zu einem gegebenem Subkontrollvolumen, d.h. einem beliebigen konvexen Polyeder, die Schnitte mit allen Punkt- und Linienquellen liefert. Eine Umstellung des Programmes auf eine Vorgehensweise, daß jedes Element nach einem Initialisierungsschritt einen Verweis auf alle Quellen/Senken mit Punkten innerhalb des Elementes verwaltet, war nicht möglich, da der gitterverwaltende Kern des Programmes UG auch in anderen Projekten verwendet wird und dadurch die Kompatibilität dieses Kerns mit anderen Modulen verlorengegangen wäre. Außerdem wäre die Nachführung dieser Verweise bei Gitteradaption oder Lastumverteilung kaum nachvollziehbar. Dementsprechend wurde eine eigene Struktur zur dynamischen Verwaltung von punktförmigen Objekten in n oder weniger Dimensionen entwickelt, die eine schnelle Nachfrage auf alle Punkte, die in einem Quader liegen, inklusive der entsprechenden Aufbau-, Umbau- und Suchoperationen implementiert. Diese Baumstruktur basiert auf einer wiederholten koordinatenweisen Bisektion eines Quaders, bis nur noch maximal ein Punkt in jedem Quader liegt. Zweige dieses Baumes, bei denen die Separation früher geschieht, werden nicht weiter verfeinert. Eine derartige Struktur wird in zwei Dimensionen Quadtree und in drei Dimensionen Octtree genannt. Die eindimensionale Version stimmt jedoch nicht mit einem binären Baum überein. Dieser Baum verwaltet Referenzen auf Objekte, deren Typ er nicht kennt, kann also in d^3f auch in anderem Zusammenhang als für Punkt- und Linienquellen verwendet werden. Zu dieser Baumstruktur gibt es die Operationen `CreateTree`, `DeleteTree`, `InsertinTree` und `DeleteObjinTree` zum Auf- und Umbau, und die Operationen `GetFirstLeafinQuader` und `GetNextLeafinQuader` zur Suche von Punkten in einem Quader. Zur Suche von Punktquellen und -senken in Subkontrollvolumen werden alle Kandidaten, die in einem umgebendem Quader liegen, mittels der gerade beschriebenen Struktur und Operationen bestimmt. Für jeden einzelnen wird dann geprüft, ob er innerhalb des Subkontrollvolumens liegt. Um Mehrfachzählung von Punktquellen, die auf Seitenflächen, Kanten oder Ecken von Subkontrollvolumen liegen, zu verhindern, wurden sie zusätzlich noch mit einem `used`-Flag versehen, das vor jeder Diskretisierung gelöscht werden muß. Die Diskretisierung bekommt von den entsprechenden Suchalgorithmen die Summe s_v der Zugabevolumina (Entnahme wird durch ne-

gative Zugabe gekennzeichnet) und für positive Zugabevolumina das volumengewichtete Mittel c_r der Zugabekonzentration zurückgeliefert. Damit ist die über das Subkontrollvolumen integrierte Gesamtmassenquelle aus Gleichung (4.2)

$$\int_{SCV} s\,d\boldsymbol{x} \quad = \quad \rho(c^*)s_v \qquad (5.67)$$

und das entsprechende Integral der Salzmassenquelle aus Gleichung (4.3)

$$\int_{SCV} s_c\,d\boldsymbol{x} \quad = \quad c^*\rho(c^*)s_v \qquad (5.68)$$

wobei $c^* \quad = \quad c_r$ für $s_v > 0$ und $c^* \quad = \quad c$ (Konzentration im Gebiet) sonst ist.

Linienquellen, die parallel zur z-Achse ausgerichtet sind, werden in der Projektion in die xy-Ebene, in der sie als Punkte erscheinen, in einem Quadtree verwaltet. Zur Bestimmung, welche achsparallelen Linienquellen sich mit einem gegebenen Subkontrollvolumen schneiden, wird auch dieses Subkontrollvolumen in die xy-Ebene projiziert. Dann werden alle Kandidaten in einem umgebenden Rechteck gesucht. Nur für diese Linienquellen werden die Schnittpunkte der Linie mit den Seitenflächen des Subkontrollvolumens bestimmt. aus diesen Schnittpunkten und den Endpunkten der Linie ergibt sich die Schnittmenge, deren Länge l vor allen Dingen interessant ist. Sie entspricht der Länge des Teilstückes des Brunnens, der im betrachteten Volumen enthalten ist. Die integrierten Quellterme werden in diesem Falle durch

$$\int_{SCV} s\,d\boldsymbol{x} \approx l\rho(c^*)s_v \qquad (5.69)$$

beziehungsweise

$$\int_{SCV} s_c\,d\boldsymbol{x} \approx lc^*\rho(c^*)s_v \qquad (5.70)$$

berechnet, wobei in diesem Falle s_v die Volumenzugabe pro Brunnenlänge ist. Nicht-achsparallele Linienquellen werden nur sequentiell gespeichert und lassen deshalb keine schnellen Suchoperationen zu. Dementsprechend sollten so viele Linienquellen wie möglich durch achsparallele Linienquellen dargestellt werden. Die Berechnung der Schnittlänge mit einem Subkontrollvolumen geschieht bei nicht-achsparallelen Linienquellen genauso wie bei achsparallelen Linienquellen, nur gibt es in diesem Fall keine Vorauswahl der möglichen Kandidaten. Die Übergabe der Quellstärke an die Diskretisierung stimmt wiederum mit den achsparallelen Linienquellen überein.

5.3.8 Integrierte Oberfläche

Der Simulator wurde auf der Basis des Programmpakets UG entwickelt. Dieses stellt als Schnittstelle zur Steuerung des Programmablaufs eine Skript-Sprache zur Verfügung. Die Anwendung der Skript-Sprache erfordert jedoch aufgrund ihrer Komplexität eine gewisse Einarbeitung. Um eine effiziente Handhabbarkeit des Programms zu gewährleisten, wurde eine dem Problem angemessene graphische Benutzeroberfläche entwickelt. Hierbei wurden verschiedene Programmkomponenten integriert.

Die Benutzeroberfläche erlaubt auch einem ungeübten Anwender, sein Modell zu konfigurieren und Rechnungen zu starten. In der Benutzeroberfläche wurden nur die für die Steuerung des Programmablaufs nötigen Parameter konfigurierbar gemacht. Eine Verwendung der Skript-Sprache für fortgeschrittene Benutzer ist auch weiterhin möglich.

5.3.9 Verifizierung

Zur Verifizierung des Rechenprogramms wurden neben den klassischen Modellproblemen

- Henry-Problem
  Eindringen von Salzwasser niedriger Konzentration in einen Aquifer.
- Hydrocoin Level 2 Case 2 (Elder-Problem)
  Problem mit freier Konvektion aufbauend auf einem Laborexperiment.

- Hydrocoin Level 1 Case 5
  Salzwassertransport in einem porösen gesättigtem Medium.

zusätzliche Testfälle erarbeitet. Diese Modellprobleme dienten dazu, die verschiedenen Teilprobleme der Dichteströmung zu erfassen und das Programm daraufhin zu testen. Im einzelnen handelt es sich um folgende Testfälle:

- Das Layered-Saltdome Problem (zweidimensional)
  besteht aus 4 Teilgebieten mit unterschiedlichen Permeabilitäten. Dieses Modell diente hauptsächlich als Test für das stochastische Modell für die Permeabilitätsverteilung (siehe Unterkapitel 8.1)
- Das Komplex-Problem (zweidimensional)
  besteht aus 49 Teilgebieten und entspricht in etwa einem realistischen Gebiet, wurde jedoch in vertikaler Richtung gestreckt. An diesem Beispiel wurde das Verhalten des Lösers bei stark springenden Koeffizienten untersucht.
- Das Layered-Saltdome Problem (dreidimensional)
  entspricht dem o.g. Testfall gleichen Namens. Es wurde in die dritte Raumdimension fortgesetzt und diente dem Nachweis, daß d^3f in der Lage ist, große komplexe Gebiete in akzeptablen Rechenzeiten zu bearbeiten.
- Das Coast Problem (dreidimensional)
  behandelt das Eindringen von Salzwasser in einen Süßwasseraquifer. In die kubische Geometrie sind zwei Schichten mit niedrigerer Permeabilität eingelagert (siehe Unterkapitel 8.2).
- Das Saltpool Problem (dreidimensional)
  ist ein Modellproblem, das auf eigens durchgeführten Experimenten beruht. Die numerischen Resultate wurden mit den experimentellen Ergebnissen verglichen (siehe Unterkapitel 7.2)

Ein Teil der Testfälle ist in den Kapiteln 6, 7 und 8 dokumentiert. Weiterhin sei auf Kapitel 9 hingewiesen, in dem die Bearbeitung realitätsnaher Testfälle dokumentiert ist. Einige der in diesem Bericht beschriebenen Testfälle wurden auch in die Testfallbibliothek [37] übernommen.

5.4 Der Postprozessor

Der Postprozessor des Programmpaketes d^3f basiert auf der Grafiksoftware GRAPE (**GRA**phical **P**rogramming **E**nvironment), die seit 1987 im Sonderforschungsbereich 256 “Nichtlineare partielle Differentialgleichungen” der Universität Bonn und seit 1992 in Zusammenarbeit mit dem Institut für Angewandte Mathematik der Universität Freiburg entwickelt wird [59], [60], [132], [133].

Da die bei der Modellierung von großen Gebieten anfallende Datenmengen enorm groß werden können, mußte vermieden werden, daß die mit dem Simulator erzeugten Daten in ein vorgegebenes Format konvertieren werden müssen. Deshalb wurde zunächst ein prozeduraler Ansatz für die Visualisierung erarbeitet. Dadurch kann der Benutzer sofort auf seinen eigenen Datenstrukturen, mit denen er auch im Simulator gearbeitet hat, visualisieren. Dazu sind lediglich einige Funktionen zur Verfügung zu stellen. Die Graphikroutinen arbeiten dabei auf einem prozeduralen Baum, und der Benutzer muß Funktionen wie “first-element” und “next-element” zur Verfügung stellen. Durch diese und einige weitere Funktionen (siehe auch Benutzerhandbuch [36]) werden zur Laufzeit des Graphikprogramms die Visualisierungs-Datenstrukturen temporär und lokal mit denen des Benutzers gefüllt. Auf dieser Basis wurde dann ein Konzept für die Visualisierung von hierarchisch organisierten Daten, wie sie bei Mehrgitterrechnungen entstehen, entwikkelt. Diese hierarchischen Datenstrukturen wurden in der Graphiksoftware GRAPE implementiert. Somit können die anfallenden Datensätze effizient visualisiert werden. Weiterhin wurde in diesem Konzept eine adaptive Visualisierung auch von nichtadaptiv berechneten Daten realisiert [67]. Durch diese effiziente Aufbereitung der Datenbasis können selbst sehr große Datensätze in Echtzeit dargestellt werden.

Für dieses hierarchische Datenkonzept wurde eine komfortable Schnittstelle zu UG entwickelt. Dadurch ist es möglich, die Datensätze ohne zusätzlichen Speicherbedarf zu übergeben, da bei der graphischen Auswertung direkt auf die UG-Daten zugegriffen wird. Hierdurch wird außerdem sichergestellt, daß die volle Funktionalität von GRAPE nutzbar bleibt.

Desweiteren beinhaltet dieses Graphikpaket die Möglichkeit, zeitabhängige Datensätze zu visualisieren. Dazu muß unter Umständen, wenn man sich nicht direkt auf einem Zeitpunkt befindet, für den berechnete Daten abgespeichert worden sind, zwischen den benachbarten Zeitpunkten interpoliert werden. Schließlich können auch adaptiv gerechnete Daten visualisiert werden. In diesem Fall kann es notwendig sein, sowohl zeitlich als auch räumlich zu interpolieren, falls der betrachtete Zeitpunkt in einem Zeitschritt liegt, bei dem das Gitter adaptiv geändert wird.

Im folgenden sollen einige Darstellungsmethoden, die in den Postprozessor integriert wurden und damit zur Visualisierung der Ergebnisse von Rechnungen mit d^3f zur Verfügung stehen, dargestellt werden. Der Einfachheit halber sollen in Unterkapitel 5.4.1 nur einige Beispiele für die Darstellung von Daten dreidimensionaler Modelle gegeben werden. Analoge Möglichkeiten stehen für zweidimensionale Modelle zur Verfügung. Weiterhin gibt es die Möglichkeit Animationen zu erstellen. Diese tragen nicht unerheblich zum Verstehen der komplexen Vorgänge bei Dichteströmungen bei, da sie die zeitliche Komponente der Prozesse sichtbar machen.

5.4.1 Darstellungen von Daten

Es gibt unterschiedliche Möglichkeiten, Modellgebiete darzustellen. In Abbildung 5.13 ist ein dreidimensionales Modellgebiet im Patch-Mode dargestellt. Dabei sind den einzelnen hydrogeologischen Einheiten unterschiedliche Farben zugeordnet.

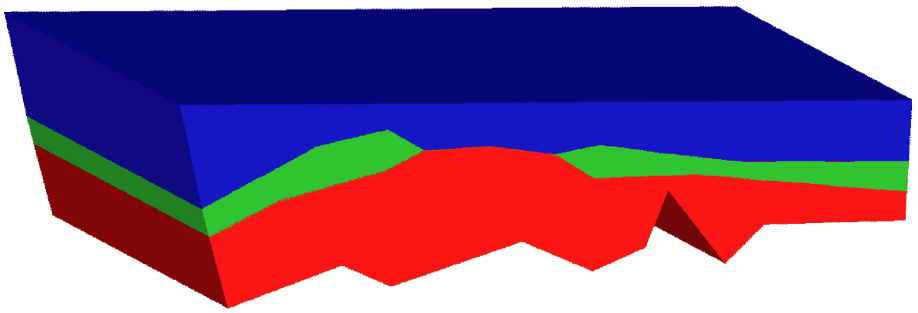


Abb. 5.13: Modellgebiet mit verschiedenen hydrogeologischen Einheiten

In Abbildung 5.14 ist dasselbe Gebiet dargestellt. Im linken Bildteil sind die Grenzen der hydrogeologischen Einheiten als Röhren dargestellt, während im rechten Teil im Grid-Mode ein Grobgitter zu sehen ist.

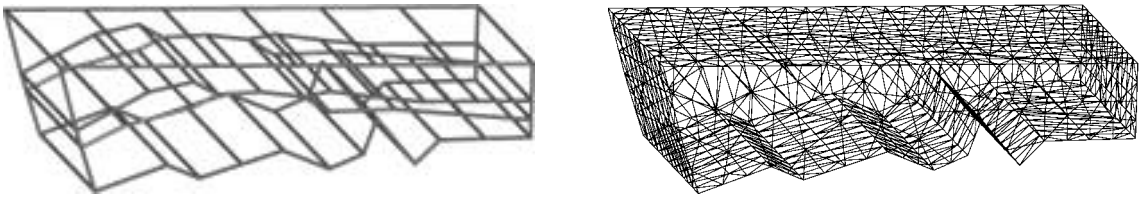


Abb. 5.14: Modell: Grenzen der hydrogeologischen Einheiten, Grobgitter

Konzentrationsverläufe können im Dreidimensionalen durch Isoflächen dargestellt werden. Es können wahlweise eine Isofläche oder aber, wie Abbildung 5.15 zeigt, auch mehrere Flächen in einem Bild dargestellt werden.

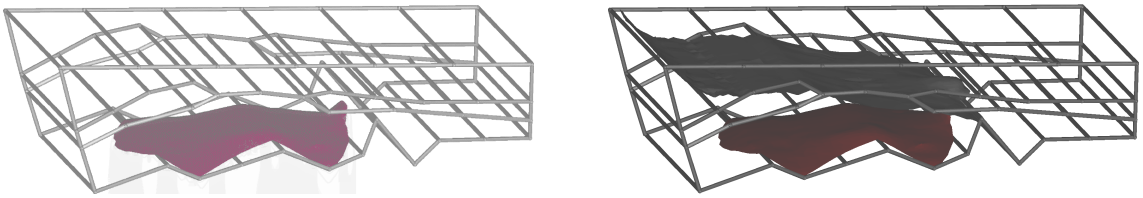


Abb. 5.15: Eine oder mehrere Isoflächen zur Konzentrationsdarstellung

Eine weitere Möglichkeit ist die Darstellung von Konzentrationen in beliebigen Schnittebenen. Dabei können Isolinien einzeln farbig oder aber als Farbverläufe dargestellt werden (siehe Abbildung 5.16). Selbstverständlich können Druckverläufe mit denselben Methoden visualisiert werden.

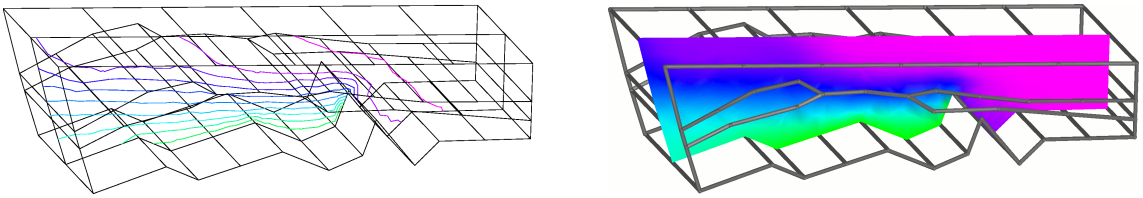


Abb. 5.16: Isolinien auf einer Schnittebene: Grid-Mode und Patch-Mode

Geschwindigkeiten können ebenfalls aus beliebigen Schnittebenen entweder als Vektoren oder als Schlierenbild visualisiert werden. Dabei ergeben die Schlierenbilder für stationäre Fälle einen besseren visuellen Eindruck des Geschwindigkeitsfeldes (siehe Abbildung 5.17).

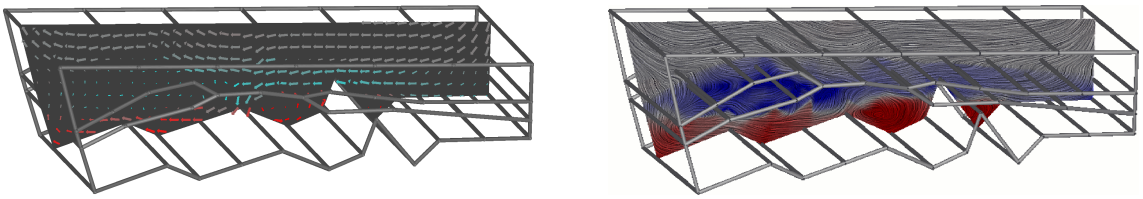
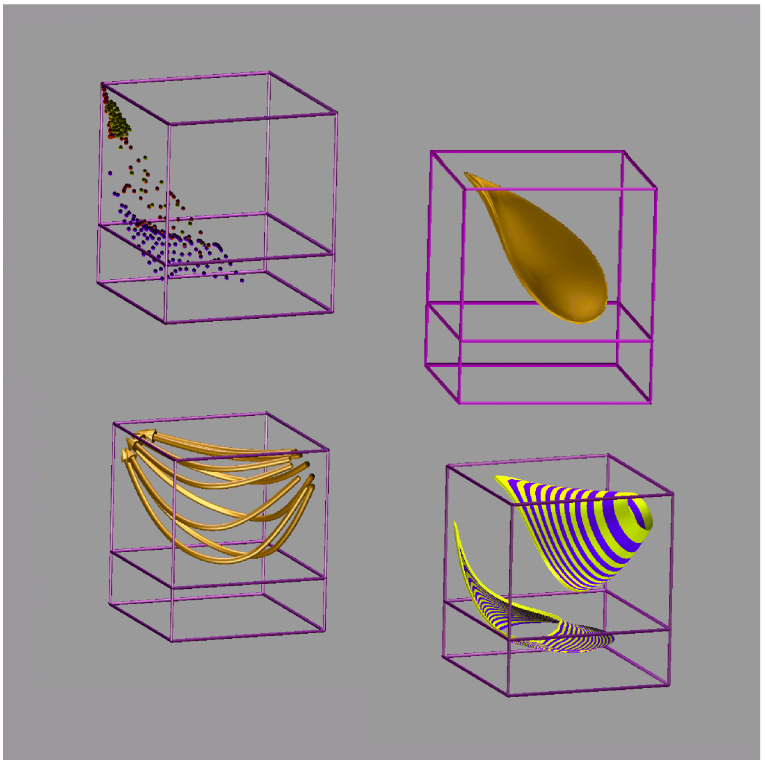


Abb. 5.17: Geschwindigkeitsdarstellung: Vektor- und Schlierendarstellung

In Abbildung 5.18 sind mehrere Methoden zur Particle-Tracking-Darstellung gezeigt. Links oben ist eine Schar von Partikeln zu sehen, deren Farbe sich im zeitlichen Verlauf ändert. Links unten sind die Bahnen mehrer Partikel dargestellt. Rechts oben wird gezeigt, wie sich ein geometrischer Körper im Laufe der Zeit verformt. Das Bild rechts unten entspricht der darüber angeordneten Abbildung, hier werden jedoch zusätzlich gleichlange Zeiträume durch einen Farbwechsel sichtbar gemacht.



bb. 5.18: Darstellungsmöglichkeiten für Particle Tracking

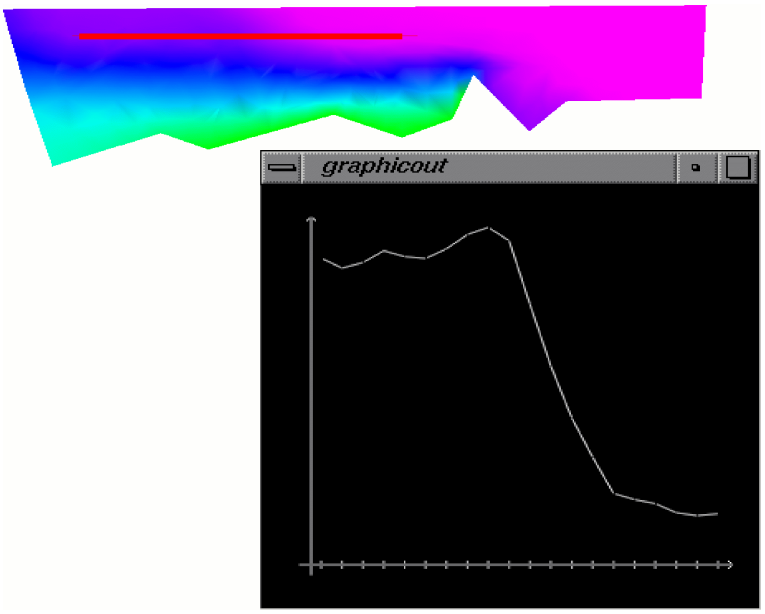


Abb. 5.19: Darstellung mit der Methode “Probe”

In Abbildung 5.19 ist die Ausgabe mit der “Probe”-Methode dargestellt. Dazu wird in einer beliebigen Schnittebene eine Linie markiert. In einem separaten Fenster wird ein xy-Plot des Konzentrationsverlaufs längs dieser Linie dargestellt. Gleichzeitig werden diese Werte in eine permanente Datei zur weiteren Verwendung geschrieben.

6 Verifizierung der Numerik

Die folgenden Probleme wurden als Testfälle für d^3f ausgesucht. Sie stellen die in der Literatur am häufigsten verwendeten Testfälle (in 2D) dar und werden in den folgenden Abschnitten im einzelnen diskutiert:

- Hydrocoin, Level 1, Case 5
- Henry Problem
- Elder Problem

Die Aussagekraft dieser Probleme ist im Hinblick auf reale Anwendungen beschränkt, aber auch als 2D-Testfälle haben sie Schwächen: Sie sind entweder zu wenig sensitiv (Henry), die Lösung ist nicht wirklich bekannt (Elder, Hydrocoin), die Eindeutigkeit der Lösung ist nicht gewährleistet - zumindest im Sinne einer stabilen Lösung - (Elder, Hydrocoin), es werden einfache Geometrien und homogene Verhältnisse vorausgesetzt (Elder, Henry, Hydrocoin), es wird entweder nur hydrodynamische Dispersion (Hydrocoin) oder nur molekulare Diffusion verwendet (Henry, Elder), und die Randbedingungen sind numerisch problematisch (Elder, Hydrocoin) oder nicht überall physikalisch sinnvoll (Henry). Wegen fehlender Referenzlösungen für das Elder- und Hydrocoin-Problem wurde ein Beispiel mit vorgegebener analytischer Lösung konstruiert. In den Kapiteln 7, 8 und 9 werden erarbeitete Testfälle vorgestellt, die in der Komplexität der Fragestellung über die obengenannten Testfälle aus der Literatur hinausgehen.

6.1 Das Problem Hydrocoin, Level 1, Case 5

Dieses Problem wurde in [156] in Anlehnung an die Verhältnisse oberhalb eines Salzstockes definiert (Abb. 6.1). Das Modellgebiet ist ein vertikaler 2D Schnitt durch einen Aquifer mit abstrahierter, einfacher Rechtecksgeometrie. In der Mitte der Aquiferbasis ist eine Dirichlet Randbedingung für die Salzkonzentration gesetzt, die einen Salzstock im Kontakt mit dem Aquifer repräsentiert. Der restliche untere Rand und die seitlichen Ränder sind undurchlässig. Auf dem oberen Rand liegt ein lineares Druckgefälle an, das einen Zustrom von Süßwasser auf der einen Seite verursacht, und auf der anderen Seite einen Ausstrom von Wasser aus dem Gebiet zur Folge hat. Die Lage des Punktes auf

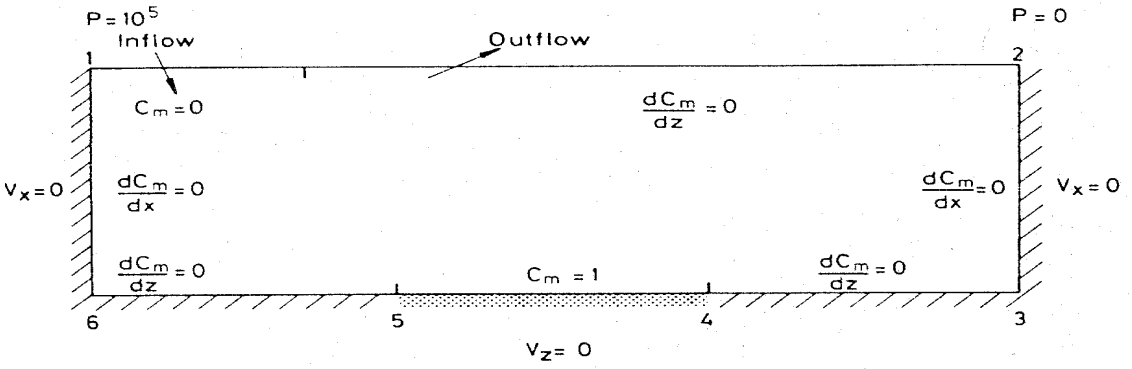


Abb. 6.1: Problemdefinition nach [38] von Hydrocoin, Level 1, Case 5

dem oberen Rand, bei dem der Zustrom in einen Ausstrom übergeht, ist a priori nicht bekannt und hängt von der jeweiligen berechneten Druckverteilung ab. Die hydrogeologischen Parameter sind über das ganze Gebiet konstant.

Dieser Problemfall war gedacht als Vergleichsmöglichkeit zwischen verschiedenen numerischen Programmen und ist auch als solcher häufig verwendet worden. Allerdings ist die Lösung nicht bekannt, somit lassen sich die mit verschiedenen Programmen berechneten Ergebnisse nur über Plausibilitätsbetrachtungen oder im Vergleich untereinander beurteilen. So gab und gibt es auch unterschiedliche Vorstellungen über das generelle Strömungsmuster der Lösung, insbesondere auch in Zusammenhang mit der Wahl verschiedener Parameter wie etwa Diffusionskoeffizient und Dispersivitäten und verschiedener numerischer Verfahren ([74], [112]).

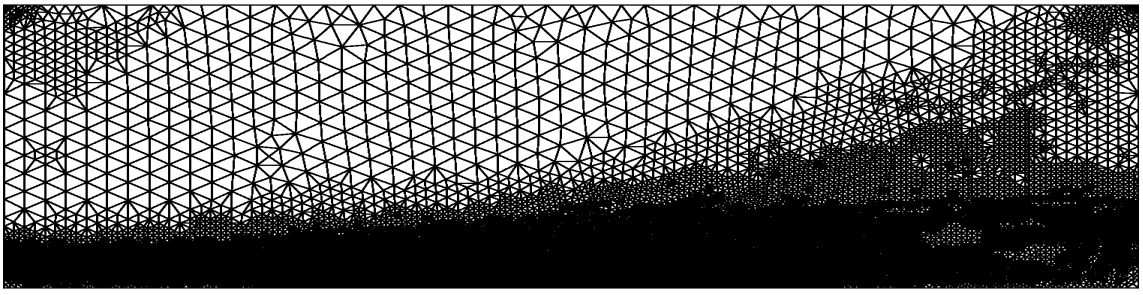


Abb. 6.2: Adaptiv angepaßtes Gitter nach 150 Jahren

Dieses Problem wurde mit der Bezeichnung Saltdome in die Testfallbibliothek aufgenommen. Die Ergebnisse zeigen eine Lösung (siehe Abb. 6.3), die etwa derjenigen in [74]

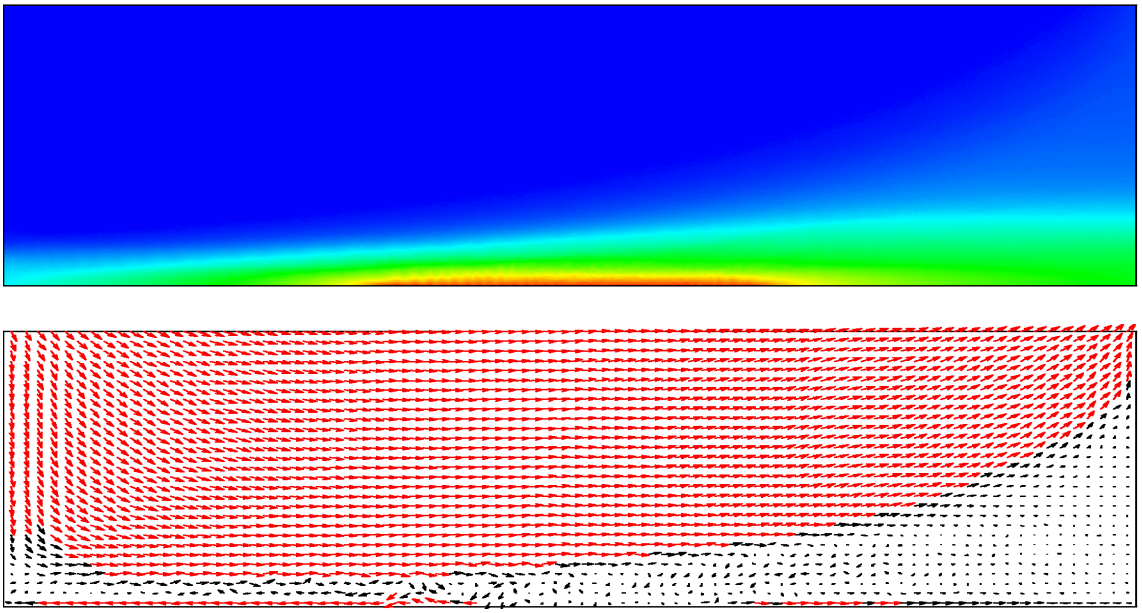


Abb. 6.3: Konzentrations- und Geschwindigkeitsfeld
150 Jahre nach Beginn mit Süßwasser innerhalb des Gebietes

entspricht. Es treten mehrere Walzen über dem Salzstock und neben dem Salzstock auf. Die Walze auf der stromaufwärts gerichteten Seite hängt in ihrer Ausdehnung sensitiv von der verwendeten Gitterfeinheit in diesem Bereich ab (siehe Abbildung 6.2).

6.2 Das Henry Problem

Dieses Problem stellt den abstrahierten Fall einer Meerwasserintrusion in einen Küstenaquifer in einem zweidimensionalen Schnitt senkrecht zur Küstenlinie dar. Es wurde von Henry erstellt [72], [73] und ist mittels dimensionsloser Parameter definiert. Dabei gelang Henry in Form einer Reihenentwicklung die Angabe einer Lösung für die stationäre Salzkonzentrationsverteilung dieses Problems. Diese Lösung ist eine sogenannte semianalytische Lösung (siehe auch Unterkapitel 6.4), die Henry auch näherungsweise auswerten konnte. Das Modellgebiet ist zweidimensional und hat eine Rechtecksgeometrie (zwei Längeneinheiten in der Horizontalen und eine Längeneinheit in der Vertikalen). Die hydrogeologischen Parameter sind im Gebiet homogen verteilt. Auf dem oberen und un-

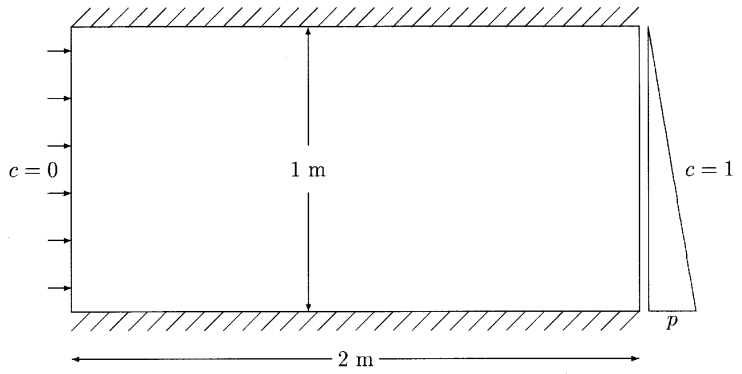


Abb. 6.4: Definition des Henry Problems

teren Rand sind Neumann-Randbedingungen mit dem Wert 0 für Druck und Konzentration vorgegeben, so daß diese Ränder undurchlässig sind. Ein Einstrom von Frischwasser erfolgt auf dem landseitigen, vertikalen Rand. Auf dem meerseitigen vertikalen Rand herrscht ein hydrostatischer Druck von Meerwasser mit c = 1, was einer Dichte vom 1,025fachen der Süßwasserdichte entspricht. Die Konzentration ist dort entsprechend auch als Dirichlet Randbedingung mit dem Wert 1 vorgegeben (siehe Abbildung 6.4). Im unteren Bereich des meerseitigen Randes erfolgt ein Einstrom von Salzwasser, im oberen Bereich fließt das landseitig eingeströmte Wasser zum Meer hinaus und in der Mitte gibt es einen Ausstrom von Mischwasser.

Gegenüber einer realen Situation hat dieses Problem den Schwachpunkt einer Ausstromrandbedingung zum Meer hin, die unphysikalisch ist. Es wird nämlich für die Konzentration auf dem meerseitigen Rand die Meerwasserkonzentration fest vorgegeben, obwohl im oberen Bereich nicht Meerwasser eindringt, sondern Wasser mit räumlich variierender Salzkonzentration. Somit wäre in diesem Bereich eine Ausstromrandbedingung vorzugeben. Für die Umsetzung einer solchen Randbedingung im numerischen Modell besteht im allgemeinen allerdings die Schwierigkeit, daß die Lage des Randpunktes, an dem der Umschlag von einem Ausstrom oberhalb zu einem Einstrom unterhalb erfolgt, nicht von vornherein bekannt ist. Rechnungen zeigen jedoch, daß der Verlauf der Konzentrationsisolinien im unteren Bereich kaum durch diese unphysikalische Wahl der Randbedingung beeinflußt wird. Um die Vergleichbarkeit mit der semi-analytischen Lösung zu gewährleisten, wurden die Testfallrechnungen mit den Originalrandbedingungen durchgeführt.

Die in früheren Arbeiten bzw. Rechnungen aufgetretenen Differenzen zwischen der von Henry angegebenen Lösung und berechneten Lösungen beruhen zum einen auf einer fehlerhaften Umsetzung des Diffusionskoeffizienten gegenüber Henrys Lösung, zum anderen wurde Henrys Lösung nicht genau genug berechnet, weil bei der Auswertung der unendlichen Reihe nur eine nicht ausreichende Zahl Terme höherer Ordnung (in Bezug zur heute gewünschten Genauigkeit) berücksichtigt wurden. Dies wurde von Segol [144] gezeigt. Eine verbesserte, korrigierte Berechnung der Lösung von Henry wurde angegeben. Bei Verwendung dieser Lösung reduzieren sich die Abweichungen der Resultate verschiedener numerischer Programme deutlich [115].

Eine nochmals verbesserte Berechnung der semi-analytischen Lösung wird in [22] angegeben. Die Abweichungen der numerischen Berechnungen von dieser Lösung sind mi-

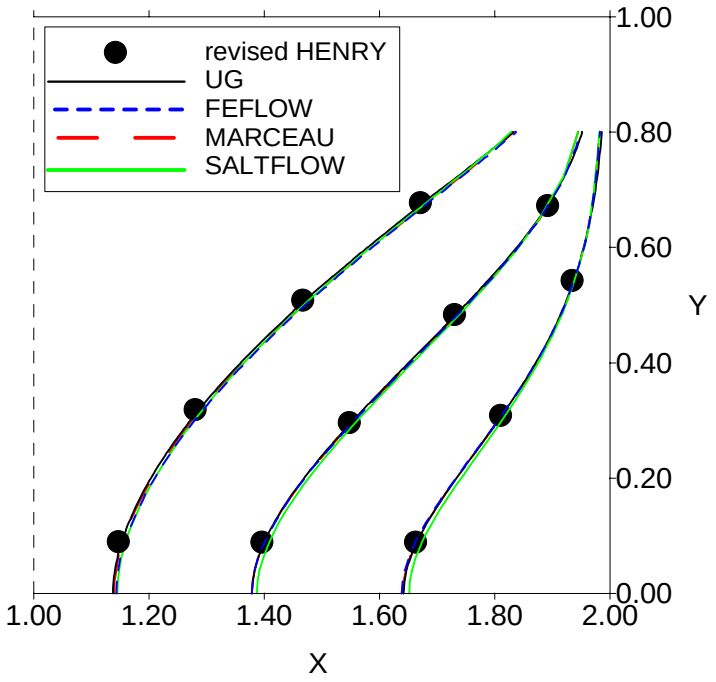


Abb. 6.5: Vergleich der d^{3}f Ergebnisse mit Rechnungen anderer Programme und mit der Lösung nach [22]. Dargestellt sind die 20%, 50% und 80% Konzentrationsisolinien (von links nach rechts)

nimal. Die Rechnungen mit verschiedenen numerischen Programmen (`Feflow`, `Marceau`, `Saltflow` (siehe Abschnitt 7.4)) geben diese Lösung sehr gut wieder. Unterschiede ergeben sich bei der Verwendung von vergleichsweise groben Gittern, d.h. Gitterweiten größer als etwa 0,05 Längeneinheiten. Die Verwendung der Overbeck-Boussi-

nesq--Approximation, die bei der Bestimmung der semi-analytischen Lösung benutzt wurde, scheint in der Praxis nicht kritisch zu sein. Auch wurde schon in der Literatur [166] darauf hingewiesen, daß dieser Testfall nichts über die Konsistenz der Geschwindigkeitsapproximation oder über die Behandlung schmaler, mehr realistischer Vermischungszonen aussagt. Das Henry Problem ist also kein sensitiver Testfall, um die qualitative Leistungsfähigkeit von numerischen Programmen beurteilen zu können. Es stellt lediglich eine Mindestanforderung dar.

Auch d^3f liefert Resultate, die sehr genau mit der Lösung nach Borisov und den Berechnungen mit den anderen Programmen übereinstimmen (siehe Abbildung 6.5). Dieses Problem ist auch in der Testfallbibliothek enthalten.

6.3 Das Elder Problem

Für dichtegetriebene Strömungen in porösen Medien, die von Temperaturgradienten induziert wurden, hat Elder Experimente in Hele-Shaw-Zellen durchgeführt [38] und eines dieser Experimente numerisch nachgerechnet und analysiert [39]. Er benutzte ein Picard-Iterations-Schema und eine Finite-Differenzen-Diskretisierung auf einem 21 x 81 Gitter für das Gleichungssystem (4.2) und (4.3) mit Overbeck-Boussinesq-Approximation in der Stromfunktionsformulierung für zwei Dimensionen (s.u.). Diese Rechnung wurde anschließend von vielen Autoren, z.B. [166], [99] und [35], als Entwurf eines Benchmarkproblems für dichteabhängige Grundwasserströmungen - auch im Zusammenhang mit Salztransport - benutzt. Dementsprechend finden sich in der Literatur viele Lösungen zu der Aufgabe, so daß dieses Problem sich zum Inter-Code-Vergleich anbietet.

6.3.1 Problemformulierung

In [38] ist dieses Problem mit

∂ [] Jacobi-Operator
A dimensionslose Rayleigh-Nummer
Θ Temperatur
Ψ Stromfunktion

dimensionsfrei für Wärmetransport formuliert als

$$\begin{aligned} \omega &= A\frac{\partial \Theta}{\partial x} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} &= \omega \\ F &= \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^2} - \partial[\Psi, \Theta] \\ \frac{\partial \Theta}{\partial t} &= F \end{aligned} \quad . \qquad (6.71)$$

Das ist eine Stromfunktionsformulierung der Overbeck-Boussinesq-Approximation des Gleichungssystem (4.2), (4.3) und (4.5). Diese Näherung betrachtet in der Gesamtmassenerhaltungsgleichung (4.2) die Dichte außer im Gravitationsterm der Darcy-Geschwindigkeit als konstant und wird deshalb durch die Volumenerhaltung $\nabla \cdot \boldsymbol{q} = s_v$ ersetzt. Dazu verwendet Elder die Randbedingungen

$\Psi = 0$ auf allen Rändern (6.72)

$\Theta = 1$ für $\frac{1}{2}(e - s) \le x \le \frac{1}{2}(e + s),\ z = 0$ (6.73)

$\Theta = 0$ sonst (6.74)

und die Anfangsbedingungen

$$\Psi = 0 \qquad t = 0 \tag{6.75}$$

$$\Theta = 0 \qquad t = 0 \tag{6.76}$$

auf einem Gebiet der Länge $e = 4$ mit einer Länge der Quelle $s = 2$ und der Gebietshöhe 1. Gemäß [166] läßt sich dieses Problem auch als Transport- und Strömungsproblem für Salzwasser in porösen Medien auffassen. Um zu physikalischen Größen der Parameter zu kommen, wird Elders dimensionsloses Problem auf ein Gebiet der Größe 600 m × 150 m skaliert.

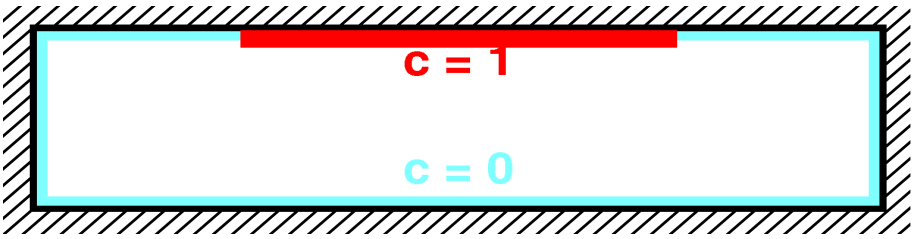


Abb. 6.6: Definition des Elder-Problems
Die dicke Randlinie bedeutet c = 1, die dünne steht für c = 0.

Dabei werden folgende physikalische Parameter verwendet:

Permeabilität k	$4{,}845 \cdot 10^{-13}$ m^2
Dynamische Viskosität ν	$1{,}0 \cdot 10^{-3}$ kg m^{-1}s^{-1}
Fluiddichte $\rho(c)$	$1000 + 200 \cdot c$ kg
Porosität ϕ	0,10
Dispersionslängen α_L, α_T	0 m
Diffusionskoeffizient D_m	$3{,}565 \cdot 10^{-6}$ m^{2}s^{-1}
Druckanfangsbedingung	hydrostatische Druckverteilung
Konzentrationsanfangswerte	$c = 0$

Die Ränder sind gemäß [166] alle undurchlässig für das Fluid. Für die Konzentrationen gelten die Dirichletwerte $c = 1$ in der Mitte des oberen Randes und $c = 0$ sonst. Da der Druck durch die Anfangs- und Randbedingungen noch den Freiheitsgrad einer additiven Konstanten aufweist, halten [166] den Druck in den beiden oberen Ecken auf 0 fest. Aus Symmetriegründen reduzieren manche Autoren, z.B.[99], das Problem auf die linke Hälfte des Gebietes. Am dabei eingefügten neuen rechten Rand gelten Neumann-Randbedingungen mit Wert 0 für Gesamt- und Salzmassenfluß als Symmetriebedingung.

6.3.2 Volumenerhaltung beim Elder-Problem

In [166] sind in den Geschwindigkeitsfeldern zum Anfangsverhalten des Elder-Problems nach innen gerichtete Geschwindigkeiten in den beiden Ecken mit Dirichlet-Randbedingung für den Druck zu sehen. Diese Geschwindigkeiten sollten in einem abgeschlossenen Modell nicht vorkommen, und es stellte sich die Frage, ob diese Geschwindigkeiten auf numerischen Fehlern oder auf Inkonsistenzen in der Problemformulierung beruhen. Bei Rechnungen mit d^3f (siehe Abbildung 6.7) konnten diese artifiziellen Geschwindigkeiten in den Ecken auch beobachtet werden, und sie wurden mit zunehmender Verfeinerung immer größer. Dadurch wird das globale Strömungsfeld durch einen Fluß aus der Ecke in die Mitte des Gebietes dominiert.

Aus den Gleichungen (4.2) und (4.3) läßt sich jeweils die Änderung der Gesamtmasse im Gebiet berechnen. Nach Gleichung (4.2) ist

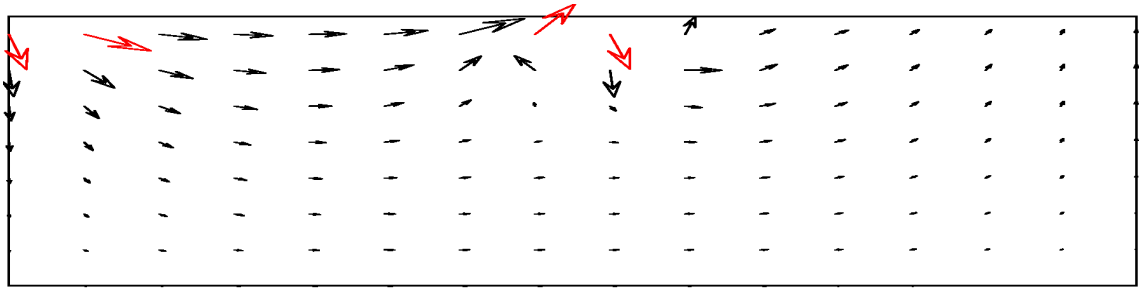


Abb. 6.7: Anfangsgeschwindigkeit mit inkonsistenten Randbedingungen
Aus Symmetriegründen wird nur die Hälfte des Modellgebietes abgebildet [143].

$$\partial_t m = \partial_t \int_\Omega \phi\rho = \int_\Omega \partial_t(\phi\rho) = -\int_\Omega \nabla\bullet(\rho \boldsymbol{q}) = \oint_\Gamma \rho \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{n} \qquad (6.77)$$

D.h. die Masse im Gebiet ändert sich wegen der undurchlässigen Ränder nicht. Aber nach der Salzmassenerhaltung ((4.3) gilt die Abschätzung

$$\partial_t m = \partial_t \int_\Omega \phi\rho = \int_\Omega \partial_t(\phi\rho) = \int_\Omega \phi\partial_c \rho \partial_t c > 0, \qquad (6.78)$$

weil für die Anfangszeit überall $\partial_t c \geq 0$ und am oberen Rand strikt $\partial_t c > 0$ ist. Somit haben wir einen Widerspruch zwischen der Gleichung (6.77) und der Ungleichung (6.78). Die Differenz zwischen den beiden Gesamtmassen ist der Massenbilanzfehler, d.h. die Masse, die durch die zusätzlichen Flüsse über die Ecken in das Gebiet strömt. Bei Gitterverfeinerung bleibt der Massenbilanzfehler der gleiche. Deshalb bleiben die Flüsse über die Randstücke zu den beiden Dirichletknoten die gleichen, und somit wächst die artifizielle Geschwindigkeit umgekehrt proportional zu der Gitterweite. Werden die undurchlässigen Randbedingungen für die Gesamtmasse durch die Bedingung verschwindenden Volumenflusses ersetzt, und wird gleichzeitig die lineare Abhängigkeit der Dichte ρ vom Salzmassenbruch c durch eine lineare Abhängigkeit der inversen Dichten

$$\frac{1}{\rho(c)} = \frac{c}{\rho(c_{max})} + \frac{1-c}{\rho(0)} \qquad (6.79)$$

ersetzt - Gleichung (4.37) definiert das „ideale Fluid“, bei dem das Mischvolumen die Summe der Volumina der Komponenten ist -, so verschwinden entsprechende Differenzen zwischen den beiden Massenberechnungen, wie das Stokesintegral von Gleichung (4.8) zeigt, und es treten keine artifiziellen Geschwindigkeiten in den Ecken auf (Abbildung 6.8).

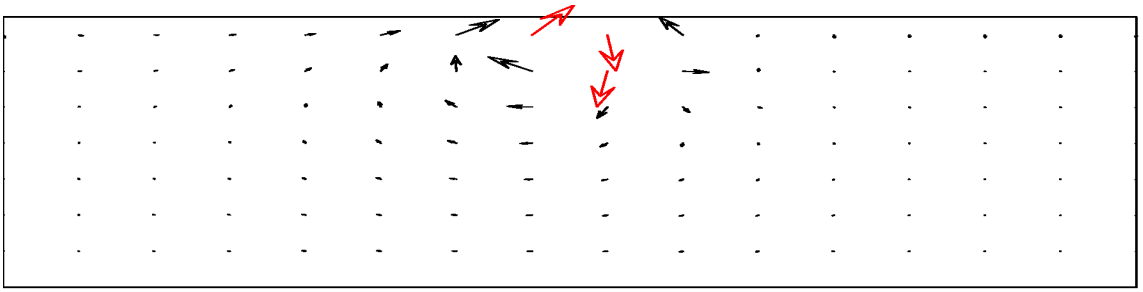


Abb. 6.8: Anfangsgeschwindigkeit ohne Volumenfluß über den Rand
Das Geschwindigkeitsfeld weist keinen Einstrom in der oberen linken Ecke auf[143].

6.3.3 Stabilität der Lösung

Die von verschiedenen Autoren präsentierten Lösungen des Elder-Problems zeigen in allen Phasen der Simulation nennenswerte Differenzen. Bei Diersch [35] lassen sich sogar verschiedenste Lösungen mit dem gleichen Code bei unterschiedlichen Diskretisierungen, Gittern, Modellapproximationen und Zeitschrittweiten finden. Diese Unterschiede lassen vermuten, daß das Elder-Problem mathematisch instabiles Verhalten zeigt, oder die Gitterfeinheit noch deutlich außerhalb des Konvergenzbereiches der Diskretisierung liegt.

Um die Stabilität des Elder-Problems zu untersuchen, wurde die Anfangsbedingung für die Konzentration im Inneren des Gebietes durch eine gaußglockenförmige Salzverteilung um einen inneren Punkt abgeändert und das so perturbierte Problem im Vergleich zu den Originalanfangsbedingungen mit dem Programm d^3f berechnet (Abbildung 6.9). Der Finger oberhalb der Störung wächst beim gestörten Problem deutlich schneller als im Originalproblem und hat nach fünf Jahren simulierter Zeit den linken Finger schon aufgesogen.

Die Entstehung dieses starken Fingers läßt sich am besten verstehen, wenn das anfängliche Geschwindigkeitsfeld (Abbildung 6.10) betrachtet wird. Die Gravitationskräfte lassen den Salztropfen nach unten sinken, und in Form einer Walze zieht er Flüssigkeit von

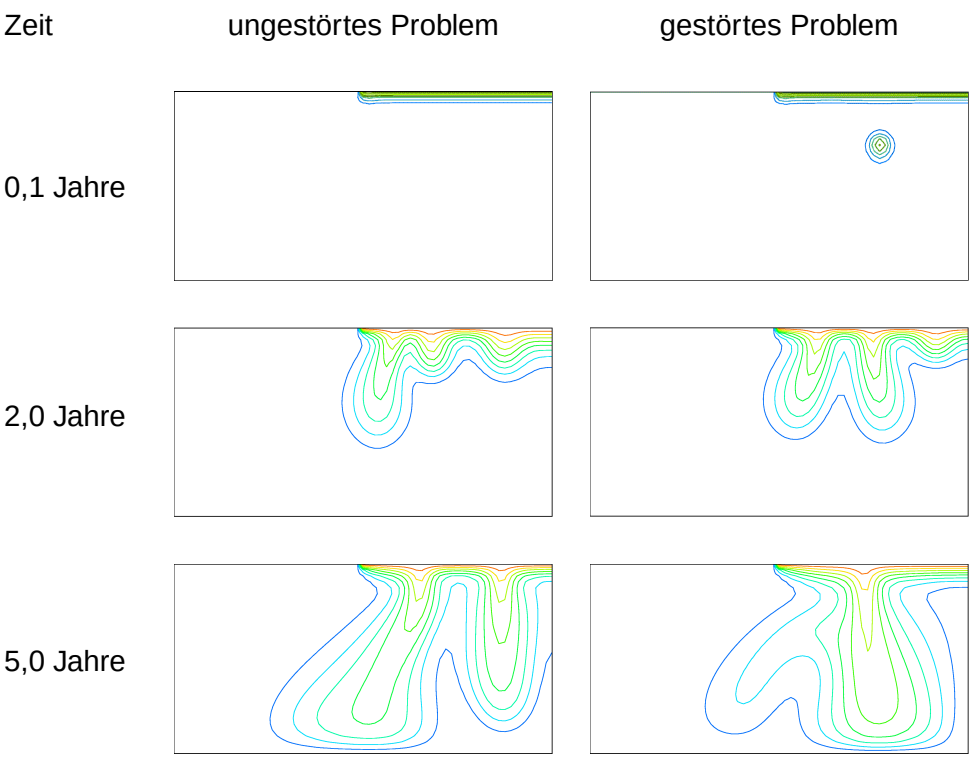


Abb. 6.9: Zeitentwicklung der Konzentrationsverteilung ohne Volumenfluß links: ungestörtes Problem; rechts: geringfügige Abänderung der Anfangsbedingung; [143]

oben nach. Dadurch wird an der entsprechenden Stelle am oberen Rand mehr Salz abgelaugt und bildet dort einen Salzfinger, der durch die Gravitation sein eigenes Wachstum verstärkt. Im Verlaufe des Fingerwachstums beim Elder-Problem breitet sich auch die zu jedem Salzfinger gehörende Strömungswalze in die transversale Richtung aus, und kleinere Finger werden von den Walzen größerer Finger in denselben hineingezogen. Beim gestörten Elder-Problem übernimmt so der zusätzliche Finger die Kontrolle über den Finger am Rand der Salzzugabelinie. Diese Untersuchung zeigt, daß das Elder-Problem sehr empfindlich auf kleine Störungen des Problems ist. Solche Störung müssen nicht unbedingt in der Anfangsbedingung auftreten. Sie können im Rahmen von numerischen Berechnungen aufgrund von Diskretisierungsfehlern, aus dem Abbruchkriterium des Lösers oder der Genauigkeit der Darstellung von Fließkommazahlen entstehen.

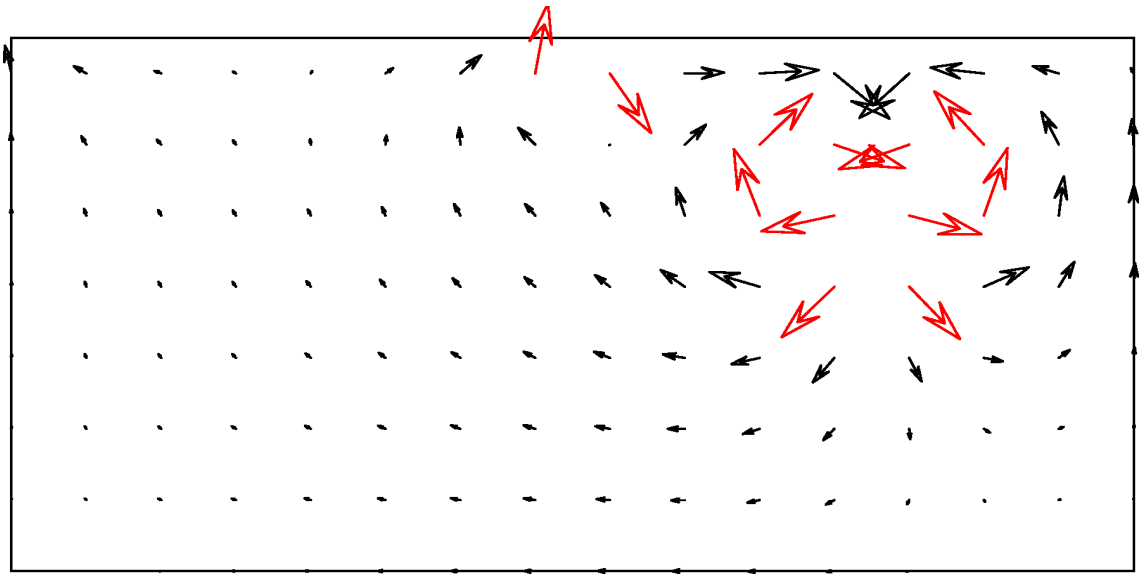


Abb. 6.10: Anfangsgeschwindigkeit für das gestörte Problem
Die Walze im Geschwindigkeitsfeld in der Nähe der Störung zieht vom oberen Rand im weiteren Verlauf einen Salzfinger nach unten (vergleiche Abbildung 6.8) [143].

Dementsprechend ist das transiente Verhalten der Lösung des Elder-Problems ungeeignet, um durch Inter-Code-Vergleiche oder fortgesetzte Gitterverfeinerung einen Code für Dichteströmungen bezüglich seiner Approximationseigenschaften zu verifizieren.

6.3.4 Eindeutigkeit der stationären Lösung

Wenn das transiente Verhalten des Elder-Problems schon sehr empfindlich auf kleine Änderungen reagiert, so könnte wenigstens noch die stationäre Lösung dieses Problems - sofern es sie gibt - geeignet sein, Benchmarking für Codes zur Simulation von Dichteströmungen im Grundwasser zu betreiben. Doch die publizierten Salzverteilungen beim Elder-Problem für lange Zeiten weisen auch Unterschiede auf. Bei [35] finden sich sowohl Lösungen mit einem Salzfinger und zwei Konvektionswalzen, als auch solche mit zwei Salzfingern und vier Konvektionswalzen. Wenn es für das Elder-Problem mehrere stationäre Lösungen gibt, so könnte die gerade besprochene Instabilität des transienten Verhaltens von der Originalanfangsbedingung zu verschiedenen stationären Lösungen ver-

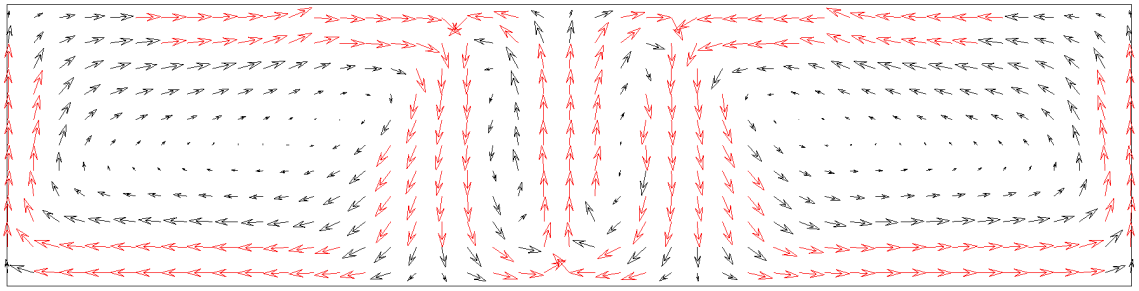


Abb. 6.11: Geschwindigkeitsfeld mit zwei Salzfingern im stationären Zustand [143]. Diese Lösung wurde auf einem adaptiven Gitter mit bis zu 160 000 Unbekannten im transienten Verlauf mit einer asymmetrischen Anfangsbedingung berechnet. Die simulierte Zeit beträgt 200 Jahre und die Ergebnisse sind in guter Näherung stationär.

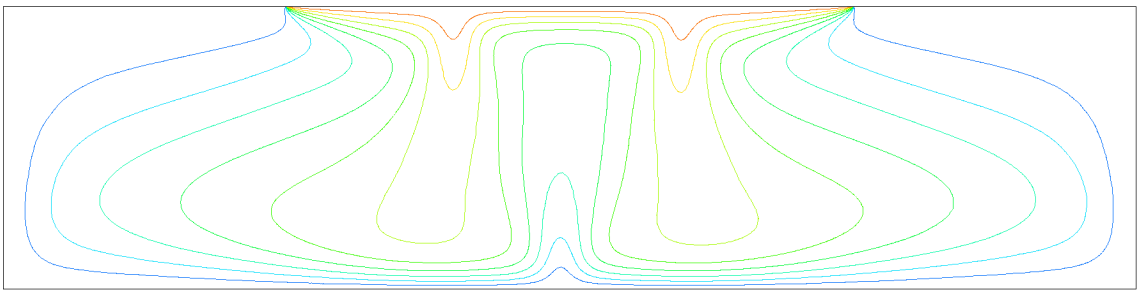


Abb. 6.12: Die Salzverteilung mit zwei Salzfingern im stationären Zustand [143]. Die Symmetrie der Lösung tritt trotz asymmetrischen Gitters und asymmetrischer Anfangsbedingung auf.

zweigen; die zwei bei [35] beobachteten stationären Salzverteilungen würden über die Anfangsinstabilität ausgewählt. Wird die Simulation hingegen zu einem späteren Zeitpunkt gestartet, so müßte die Lösung schon zum Einzugsbereich einer der stationären Lösungen des Elder-Problems gehören und Störungen während der transienten Rechnung dürften die Lösung nicht mehr zu einer anderen stationären Lösung führen. Wenn sich durch geänderte Anfangsbedingungen gezielt bestimmte stationäre Lösungen des Problems unabhängig von Lösereinstellungen und Diskretisierung anlaufen lassen, so sollte das analytische Problem über eine stationäre Lösung in der Nähe der numerischen stationären Lösung verfügen. Von der Idee kommend, daß die stationäre Lösung des Elder-Problems sich aus mehreren Benard-Zellen zusammensetzen muß, wurde ange-

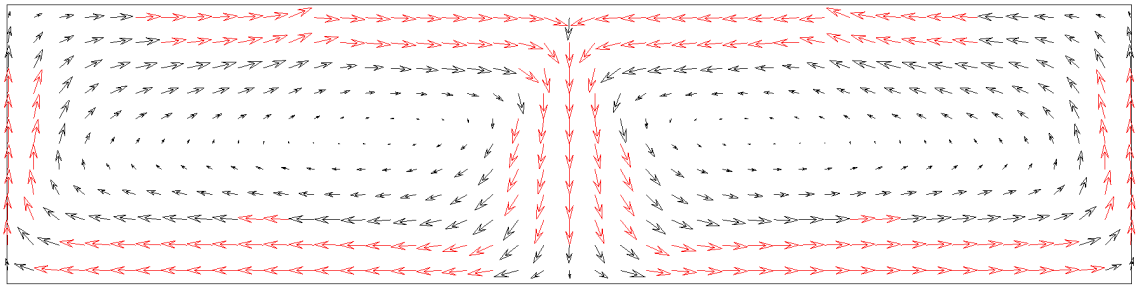


Abb. 6.13: Geschwindigkeitsfeld mit einem Salzfinger im stationären Zustand [143]. Diese Lösung wurde auf adaptiven Gittern mit fast 110 000 Unbekannten im transienten Verlauf mit einer asymmetrischen Anfangsbedingung berechnet. Die simulierte Zeit beträgt 200 Jahre, und die Ergebnisse sind in guter Näherung stationär.

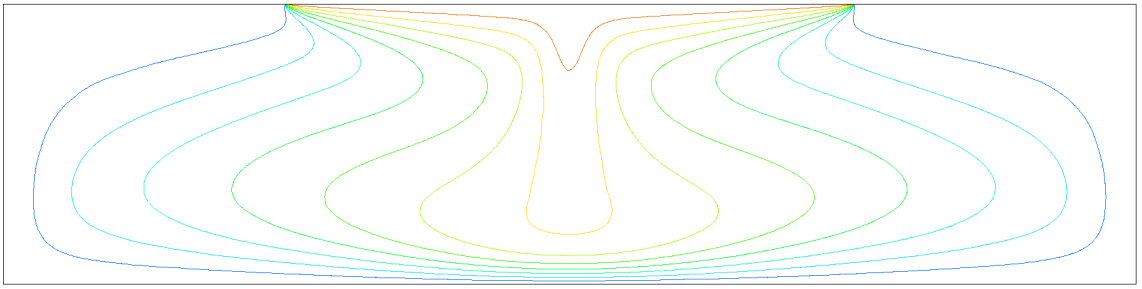


Abb. 6.14: Die Salzverteilung mit einem Salzfinger im stationären Zustand [143]. Auch diese Lösung ist trotz asymmetrischer Anfangsbedingung und asymmetrischen Gitters symmetrisch.

nommen, daß sich die unterschiedlichen stationären Zustände des Elder-Problems durch die Zahl der Finger und damit durch die Zahl der Konvektionszellen unterscheiden. Symmetriebetrachtungen legen nahe, daß es nur Lösungen mit einem Finger und zwei Konvektionszellen, mit zwei Fingern und vier Zellen, mit drei Fingern und sechs Benard-Zellen usw. geben kann. Dementsprechend wurde mit wellenförmigen Konzentrationsanfangsbedingungen unterschiedlicher Frequenzen versucht, gezielt eine der Moden anzuregen.

Durch dieses Verfahren konnten stationäre Lösungen mit einem und mit zwei Fingern berechnet werden; bei Anregungen mit höheren Frequenzen in der Anfangsbedingung vereinigten sich einige der Finger und das System tendierte wieder zu einer der beiden genannten stationären Lösungen. Das läßt darauf schließen, daß es stationäre Lösungen mit mehr Fingern entweder nicht gibt, oder daß deren Einzugsbereich im Raum aller Anfangsbedingungen sehr klein ist.

Die Rechnungen zu den stationären Lösungen wurden mit adaptiver Gitteranpassung auf dem ganzen Gebiet des Elder-Problems (keine Reduktion wegen der Symmetrie) durchgeführt. Auch bei symmetrischen Anfangsbedingungen zeigten sich im transienten Verlauf Asymmetrien, die von der schon genannten Instabilität des transienten Elder-Problems herrühren. Dadurch wurden die Gitter im Laufe der Simulation asymmetrisch verfeinert und vergröbert. Die stationären Lösungen lassen sich auffassen als zwei verschiedene Lösungen für das halbierte Problem auf den unterschiedlichen Gittern der linken und rechten Gebietshälfte. Um diese Tests über die Symmetrie zu verstärken, wurden die Anfangsbedingungen leicht asymmetrisch gewählt. Dementsprechend läßt sich aus der Symmetrie der stationären Lösung auf eine Stabilität dieser Lösung bezüglich des Rechengitters und leichter Störungen in der Anfangsbedingung schließen. Diese stationären Lösungen des Elder-Problems mit einem und mit zwei Fingern lassen sich verwenden, um entsprechende Simulatoren bezüglich der Diskretisierung der Ortsableitungen und der Randbedingungen zu testen. Leider sind die publizierten Ergebnisse zum Elder-Problem, z.B. in [39] oder auch in [166], für einen derartigen Vergleich zwischen verschiedenen Codes ungeeignet, da die simulierten Zeiten häufig bei 20 Jahren aufhören und zu diesem Zeitpunkt das qualitative Verhalten (ein oder zwei Finger) noch nicht einmal immer ersichtlich ist. Damit bleibt das Elder-Problem nur noch zum Benchmarking durch wiederholte Gitterverfeinerung nutzbar. Die hier präsentierten stationären Lösungen wurden mit 100 000 bis 160 000 Unbekannten berechnet.

6.4 Benchmarking mit vorgegebener Lösung

Zu den Gleichungen (4.2) und (4.3) gibt es keine nicht-trivialen Probleme, bei denen die analytische Lösung bekannt ist. Das von [73] vorgeschlagene Meerwasserintrusionsproblem, das in diesem Bericht im Unterkapitel besprochen wurde, besitzt keine ana-

lytische Lösung. Das von Henry präsentierte Lösungsverfahren ist ein spektrales Galerkin-Verfahren; es stellt nur eine ungebräuchliche Diskretisierung dar [127]. Zum anderen basiert sein Problem auf der Overbeck-Boussinesq-Annahme, so daß beim Vergleich zwischen einer semi-analytischen Lösung von Henrys Aufgabe und einer numerischen Lösung des Gleichungssystems (4.2) und (4.3) sowohl Fehler in der semi-analytischen Lösung, als auch Approximationsfehler durch die Overbeck-Boussinesq-Annahme wie Fehler der numerischen Lösung aussehen können. Gerade deshalb ist es notwendig, einen weiteren Testfall zu kreieren, dessen Lösung im Rahmen der vorgestellten Gleichungen exakt bekannt ist und bei dem Abweichungen von dieser Lösung nur auf Fehlern in der numerischen Approximation beruhen können. Derartige Beispiele lassen sich konstruieren, indem zwei beliebige zweimal stetig differenzierbare Funktionen p und c, die von Ort und Zeit anhängen, genommen werden, für die Parameter und Zustandsgleichungen im Gleichungssystem (4.2) und (4.3) Werte bzw. Funktionen festgelegt werden und aus Gleichung (4.2) die Quelldichte s für die Gesamtmasse und aus Gleichung (4.3) die Quelldichte s_c für die Salzmasse berechnet wird. Aus dem Definitionsbereich der beiden Funktionen wird eine glattberandete Teilmenge $\Omega \times [T_0, T_1]$ als Gebiet für das Problem gewählt. Die Randbedingungen seien von Dirichlet-Typ mit $p_r = p|_{\partial\Omega}$ und $c_r = c|_{\partial\Omega}$. Die am Anfang gewählten Funktionen p und c sind Lösungen dieses Problems, über die Eindeutigkeit läßt sich leider nichts aussagen.

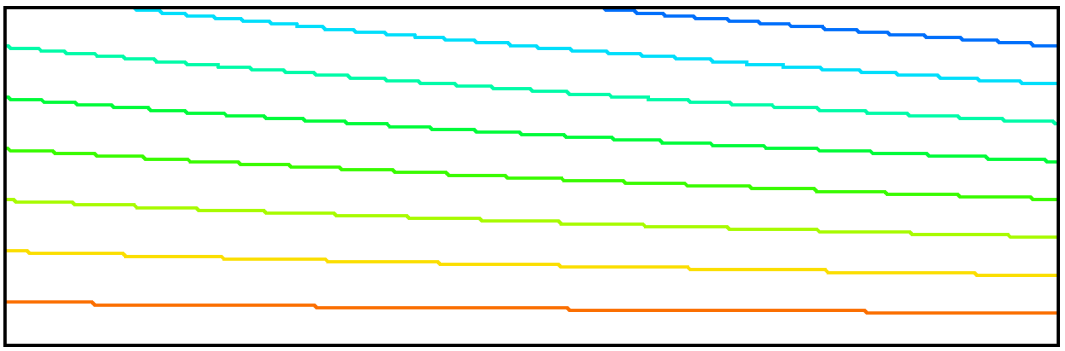


Abb. 6.15: Analytisch vorgegebene Druckverteilung
Der hydrostatische Druck ist überlagert mit einem Druckgefälle von links nach rechts mit nach unten abnehmender Wirkung

Derart gebastelte transiente Testfälle bringen das Problem mit sich, daß die Quell- und Senkenterme das Geschehen dominieren können und somit nur noch die Diskretisierung der Zeitableitungen und nicht die Ortsdiskretisierung getestet wird. Bei stationären Benchmarks sind die Quellen und Senken von derselben Ordnung wie der Differentialoperator des Ortes in den Gleichungen. Es wird also die Ortsdiskretisierung getestet. Wegen der Nichtlinearitäten der Differentialgleichungen (4.2) und (4.3) läßt sich aus der Approximationseigenschaft der Diskretisierung für einen Testfall nur etwas sagen über die Approximationseigenschaft ähnlicher Anfangsrandwertprobleme zu den partiellen Differentialgleichungen. Deshalb wurde eine Salz- und Druckverteilung angesetzt, die eine gewisse Ähnlichkeit mit dem Testfall Hydrocoin Level 1, Case 5 [156] hat, der in Unterkapitel 6.1 vorgestellt wurde. Diese Funktionen verfügen noch über frei zu wählende Parameter, so wie auch in den Gleichungen Parameter noch gewählt werden können. Diese Freiheitsgrade wurden nach analytischer Berechnung der Quellterme so bestimmt, daß diese Quellterme klein sind und somit der Testfall möglichst nahe an einem realistischen quellfreien Fall liegt. Der Salzmassenbruch und die Druckverteilung wurden für ein dimensionsloses gewähltes Problem angenommen als

$$p = (1 - z)(g\rho_0 - \Delta_z \sqrt{z - z_s}) + \Delta_x((3 - x_s) - (x - x_s)z) \qquad (6.80)$$

$$c = \left(1 + \sigma e^{-\frac{x}{r}} + \frac{-\frac{9}{2} + \frac{2z^2}{h^2} + (x - 3 - \beta z)^2 + (x - \beta z)^2}{\gamma} \right)^{-1} \qquad (6.81)$$

mit den in Tabelle 6.1 angegebenen Freiheitsgraden und Parametern.

Die Druck- und Konzentrationsverteilungen sind in den Abbildungen 6.15 bzw. 6.16 dargestellt.

Mit Hilfe mathematischer Algebraprogramme wurden die beiden Quellterme analytisch berechnet und als C-Quellcode generiert.

Tabelle 6.1: Parameter des Benchmark-Problems

Symbol	Wert	Bezeichnung
τ	20	Stromlinienbetonung
σ	12	Gewichtsfaktor
h	0,14	Achsenverhältnis
β	1	Scherung
ρ_0	1	Frischwasserdichte
γ	1	Normierung
Δ_x	0,1	mittlerer Druckgradient in *x*-Richtung
Δ_z	0,02	mittlerer Druckgradient in *z*-Richtung
x_s	1	Druckumschlaglinie
z_s	-0,1	Referenzhöhe
ϕ	1	Porosität
g	1	Erdbeschleunigung
k	10	Permeabilität
μ	1	Viskosität
D_m	1	molekulare Diffusionskonstante
$\frac{\partial \rho}{\partial c}$	0,1	Dichteableitung
$\rho(c)$	$\rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial c} c = 1 + 0{,}1c$	Zustandsgleichung für die Dichte

Die Verteilungen der Zugaben und Entnahmen in den Abbildungen 6.16 und 6.17 zeigen beide eine recht große, fast quellfreie Fläche im oberen Bereich, so daß in diesem Bereich ein quellfreier Fall getestet wird. Auch die sonstige Quellverteilung stimmt gut mit der Idee eines Problems mit einer Salzzugabe am unteren Rand überein. Dieser Fall scheint geeignet, einen Test für Dichteströmungscodes für Fälle mit Salzablaugung im unteren Aquiferbereich und einer oben induzierten globalen Strömung zu liefern.

Das Programm d^3f wurde mit der so aufgestellten Aufgabe konfrontiert, wobei die exakte Lösung für den Druck und die Konzentration als Anfangsbedingungen gewählt wurden, damit die Simulation im Falle mehrerer stationärer Lösungen die gewünschte ansteuert.

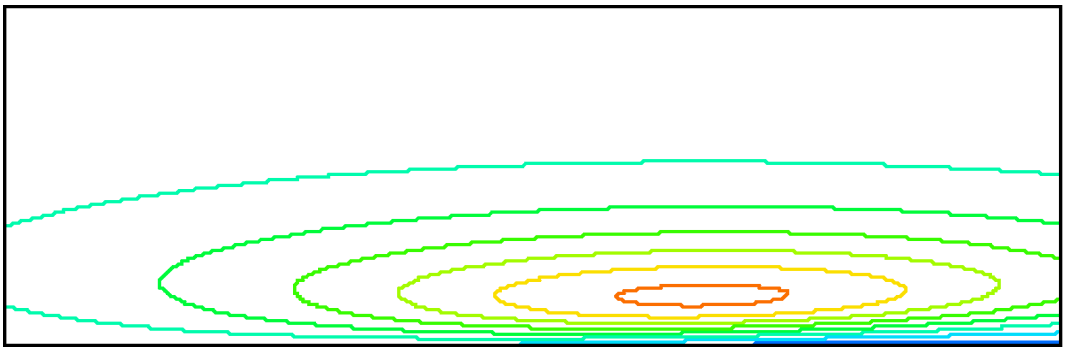


Abb. 6.16: Analytisch berechnete Verteilung der Gesamtmassenzugabe
Türkis stellt die Linie dar, auf der die Massenzugabe den Wert Null hat. Die Zugabe ist zum größten Teil auf einen Bereich rechts unterhalb der Mitte konzentriert.

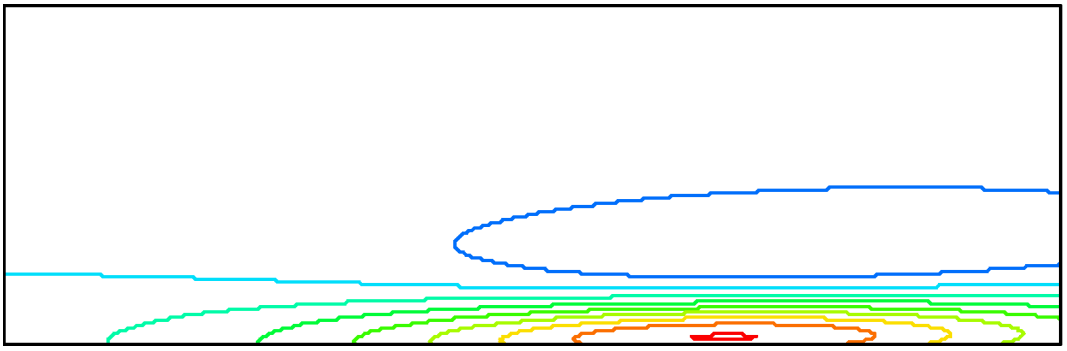


Abb. 6.17: Analytisch berechnete Verteilung der Salzmassenzugabe
Die Linie, auf der keine Salzmassenzugabe stattfindet, ist hellblau. Die Zugaben sind sehr stark am unteren Rand konzentriert. Rechts in mittlerer Höhe sind leichte Salzentnahmen zu erkennen.

Die so gewählte Anfangsbedingung war in der Diskretisierung noch nicht der stationäre Fall, aber nach zwölf Zeitschritten war die Änderung innerhalb eines Zeitschrittes um mehr als vier Zehnerpotenzen reduziert, so daß diese Lösung als stationäre Lösung des diskretisierten Problems aufgefaßt werden kann. Diese Lösung ist in den Abbildungen 6.18 und 6.19 visualisiert.

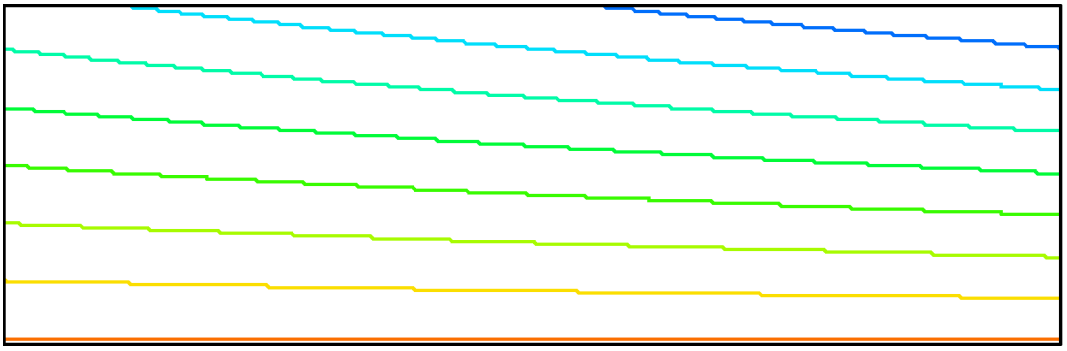


Abb. 6.18: Mit d^3f berechnete Druckverteilung
Optische Unterschiede zu der vorgegebenen Druckverteilung basieren hauptsächlich auf der dynamisch angepaßten Farbskala.

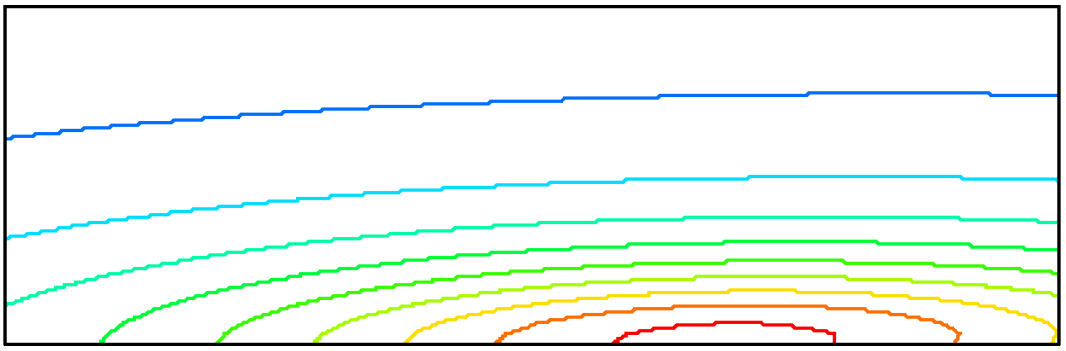


Abb. 6.19: Mit d^3f berechnete Salzverteilung
Diese läßt sich optisch - auch durch Übereinanderlegen - nicht von der vorgegebenen Verteilung unterscheiden.

Um die Genauigkeit der Ergebnisse mit d^3f besser beurteilen zu können, stellen die Abbildungen 6.20 und 6.21 die Differenzen zwischen exakter Lösung und berechneter Lösung dar. Der maximale Fehler im Druck beträgt $5 \cdot 10^{-5}$ bei Drücken im Gebiet zwischen 0 und 1,13, von denen der nicht-hydrostatische Anteil zwischen 0 und 0,13 liegt. Im Salzmassenbruch ist der maximale Fehler $7 \cdot 10^{-4}$ bei einem Wertebereich von 0 bis 1. Damit

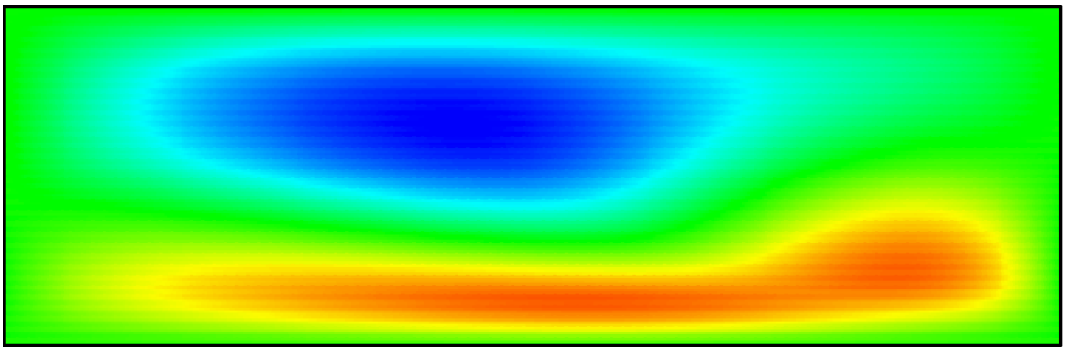


Abb. 6.20: Abweichung zwischen berechnetem und vorgegebenem Druck
Rot bedeutet, daß der Wert von d^3f um ca. $4 \cdot 10^{-5}$ zu groß ist, blau, daß der Wert um ca. $5 \cdot 10^{-5}$ zu klein ist. Grüne Bereiche kennzeichnen besonders geringe Abweichungen.

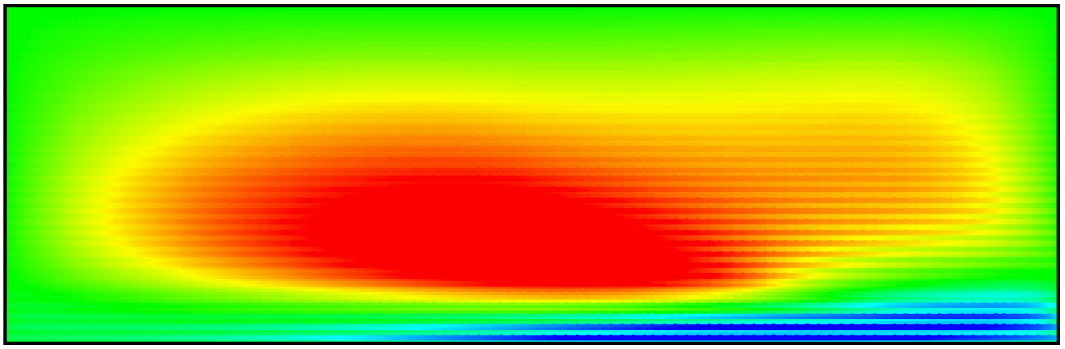


Abb. 6.21: Abweichung zwischen berechneter und vorgegebener Konzentration
Rot bedeutet, daß der Wert von d^3f um ca. $7 \cdot 10^{-4}$ zu groß ist, blau, daß die Konzentration um ca. $6 \cdot 10^{-4}$ zu klein ist.

liegen die Fehler für den Druck bei ca. $\frac{1}{20}$-tel Promille und in der Konzentration immer noch unter einem Promille. Diese Abweichungen sind ungefähr viermal so groß, wie der Fehler bezüglich der Supremumsnorm bei der besten Approximation der exakten Lösungen auf dem verwendeten Rechengitter. Die Verteilung der Fehler über das Gebiet zeigt zum größten Teil eine Abhängigkeit des Fehlers vom Abstand vom Rand. Daß die Fehler auf dem Rand verschwinden, ist aufgrund der Fragestellung als Dirichlet-Problem schon

vorgegeben. Lediglich die Salzverteilung hat eine sehr große Abweichung von der exakten Lösung in der Nähe des unteren Randes. Dieses läßt sich auf die großen Gradienten der Salzmassenzugabe in diesem Bereich zurückführen. Diese Quellverteilung kann auf dem verwendeten Gitter nur grob approximiert werden. Daraus resultieren lokale Fehler, die aber auch das globale Verhalten beeinflussen. Es ist anzunehmen, daß die Fehler in der Konzentration bei einem glatteren Quellverlauf noch geringer wären. Die mit d^3f berechnete Lösung stimmt hervorragend mit der vorgegebenen analytischen Lösung überein.

In den neueren Versionen von d^3f ist dieser Test nicht mehr anwendbar. Das Konzept der Quell- und Senkenterme wurde von Massenflüssen auf Volumenflüsse und Konzentrationen umgestellt. Das oben vorgestellte Problem läßt sich daher nicht mehr in dieser Weise formulieren.

7 Neue physikalische Testfälle in 3D

Um letztlich die Aussagefähigkeit eines numerischen Codes realistisch beurteilen zu können, müssen Testfälle verwendet werden, die eine reale Situation beschreiben. Beim Vergleich von numerischen Lösungen mit den Ergebnissen von Experimenten sind folgende Punkte für einen solchen Testfall zu beachten:

- Die Ergebnisse der Rechnungen basieren sowohl auf den kontinuierlichen Gleichungen als auch auf den numerischen Lösungsverfahren. Beim Vergleich der Ergebnisse mit einer exakten Lösung - falls vorhanden - kann direkt die Qualität der numerischen Lösung des Problems getestet werden. Im Falle eines Vergleichs mit experimentellen Ergebnissen ist dies anders. Nur wenn die kontinuierlichen Gleichungen die betrachtete, reale Situation adäquat beschreiben, stellt ein Vergleich (unter Berücksichtigung der Meßfehler) einen Test ausschließlich für die Numerik dar. Die Gültigkeit der Gleichungen für die hier verwendeten Situationen ist allerdings nicht beweisbar, sondern muß vorausgesetzt werden.
- Eine reale Situation wird erfaßt durch Messungen der verschiedenen involvierten Parameter (wie Permeabilität, Geometrie, etc.) und der Variablen (wie Druck und Konzentration). Ebenso werden Rand- und Anfangsbedingungen gemessen oder vorgegeben. Auf jeden Fall sind all diese Größen fehlerbehaftet. Bei Feldfällen, also Problemgebieten, die in wirklichem geologischem Umfeld liegen, ist in aller Regel die räumliche Dichte der Meßpunkte bezüglich geologischer Parameter, Anfangsbedingungen und Druck- und Konzentrationsverteilung nicht ausreichend, um einen derartigen Fall als Test für ein numerisches Programm sinnvoll verwenden zu können. Statt dessen wird in solchen Fällen eine Eichung des Modells durchgeführt, was also eine Anpassung von Modellparametern über den Vergleich der Rechenergebnisse mit Meßwerten bedeutet. Aus diesem Grund kommen nur klein- oder mittelskalige, vollständig kontrollierbare Problemfälle, also Laborexperimente, als echte Testfälle in Frage, nicht aber Feldfälle.
- Zum Vergleich der Resultate müssen Kriterien gefunden werden, anhand derer der Vergleich durchgeführt werden kann. Leicht überschaubare Vergleichsgrößen sind etwa die Position von Isoflächen oder Isolinien und die Ganglinien an ausgewählten Punkten. Im Idealfall sollte eine Reihe von Vergleichskriterien vorliegen, die sensitive und weniger sensitive Verhaltensmerkmale abdecken.

Die überwiegende Anzahl der bereits zur Verfügung stehenden physikalischen Testfälle sind lediglich zweidimensional ([138], [113], [114], [71], [174]). d^3f soll jedoch insbesondere für dreidimensionale Situationen getestet werden. Dreidimensionale Messungen von Dichteströmungen waren kaum als Testfall geeignet [120] oder sind noch nicht abgeschlossen [175]. Deshalb war es eine der Zielsetzungen, dreidimensionale physikalische Testfälle zu entwerfen, Messungen durchzuführen und mit Rechnungen zu vergleichen. Das Meßverfahren und die Testfälle werden in den folgenden Unterkapiteln besprochen.

7.1 Experimentelles Verfahren

Eines der verfügbaren Verfahren zur Gewinnung von dreidimensionalen Daten ist die Kernspintomographie (NMR), eingesetzt als bildgebendes Verfahren (Magnetic Resonance Imaging, MRI) [120], [121]. Häufig arbeiten die MRI Apparate nur auf einer Frequenz, die geeignet ist, um Wassermoleküle zu detektieren. Durch spezielle Verfahren ist es aber auch möglich, solche Apparate zur indirekten Messung anderer, in Wasser gelöster Stoffe zu verwenden. Solche Tracer-Verfahren bieten die Möglichkeit, in der Medizin eingesetzte Standard-Tomographen auch für die Messung der dreidimensionalen Verteilung von bestimmten gelösten Stoffen einzusetzen. Durch wiederholte Messung kann auch die zeitliche Entwicklung dieser räumlichen Stoffverteilung verfolgt werden (siehe auch [116]). Für die hier dargestellten Experimente wurden zwei unterschiedliche Magnettomographen verwendet, das Magnetom SP 63/84, Siemens, Erlangen (1,5 Tesla) und ein Philips Gyroscan ACS/NT 1,5 T. Beide sind dimensioniert als Ganzkörpertomographen für medizinische Zwecke. Dementsprechend waren der Größe des Experiments Grenzen gesetzt.

Das Meßverfahren benutzt eine zweidimensionale Spinechosequenz, bei der in Abständen der Zeit T_R jeweils ein Anregungspuls, gefolgt von einem Lesepuls, nach der Zeit T_E eingestrahlt wird. Das dreidimensionale Volumen wird dabei in Schichten zeitlich kurz aufeinanderfolgend gemessen und zum 3D-Gesamtvolumen zusammengesetzt. Jede einzelne Schicht wird aus einem orthogonalen Raster von diskreten Meßvolumina aufgebaut, die Voxel genannt werden. Für jedes einzelne Voxel erhält man in der Messung eine Signalstärke, die dann dem Mittelpunkt des Voxels zugeschrieben wird (siehe z.B.

[61]). Jede Schicht bestand hier aus einer Matrix von 128 × 128 Voxeln. Die verwendete Spinechozeit T_E war 15 ms und die Wiederholungszeit T_R betrug 300 ms. Für jede Messung wurden die gemessenen Signalstärken aus zwei Durchläufen gemittelt, um das Verhältnis vom Signal zum Rauschen zu verbessern. Bei diesen Einstellungen dauerte eine Messung etwa 3 Minuten. Als NMR-Tracer eignen sich paramagnetische Ionen wie Ni^{2+}, Cu^{2+} oder Mn^{2+}. Sind diese in Wasser gelöst, so verändern sie durch ihren Spin das Verhalten des sie umgebenden Wassers und dadurch das gemessene Signal. Allerdings beeinflußt auch schon das Vorhandensein eines porösen Mediums die Reaktion der Wassermoleküle signifikant gegenüber einer Tracer-Wasser-Lösung ohne poröses Medium. So werden die Spin-Gitter-Relaxationszeit T_1 und die Spin-Spin-Relaxationszeit T_2 (für Definitionen siehe [31]) im porösen Medium verkleinert. Wesentlich dabei ist die Größe der wassergefüllten Poren und die Porosität. Schwanken diese Eigenschaften innerhalb des gemessenen Volumens, so schwankt dadurch auch die Signalstärke. Aber selbst in einem - aus hydrodynamischer Sicht - homogenen Medium aus kugelförmigen Körnern ist die Porosität von Voxel zu Voxel etwas verschieden, solange ein Voxel nicht eine sehr große Anzahl von Körnern enthält. Zudem sind in jedem realen homogenen Medium auch immer kleine Schwankungen der Porosität vorhanden.

Hat das Material des porösen Mediums paramagnetische oder sogar ferromagnetische Bestandteile oder sind solche als Verunreinigungen im Wasser vorhanden, so kann dies das Signal einer ganzen Gruppe von Voxeln vollkommen verfälschen. Ähnlich würden sich auch eingeschlossene Luftblasen auswirken. Letztlich zeigt das poröse Medium durch seinen Aufbau eine räumliche Variation der Signalstärke bis hin zum lokalen Verlust eines verwertbaren Signals. Weitere Störungen des Signals sind bei hohen Konzentrationen des Salzwassers auch durch Abschirmeffekte möglich. Diese Störungen verlangen neben dem Rauschen eine geeignete Berücksichtigung bei der Interpretation der gemessenen Bilder.

Die Variation der magnetischen Eigenschaften mit der Konzentration der Lösung ist der Effekt, der das Tracerexperiment ermöglicht. Die Größe $1/T_1$ verhält sich unter geeigneten Bedingungen näherungsweise proportional zur Konzentration des paramagnetischen Ions in Lösung ([32], [110]), wohingegen der Einfluß der Konzentration auf T_2 für kleine Konzentrationen nur gering ist. Beide Wechselwirkungszeiten T_1 und T_2 bestimmen zusammen mit den Parametern des Meßverfahrens (wie etwa T_R und T_E und die Struktur

des porösen Mediums) das gemessene Signal innerhalb eines Voxels. Mittels einer Eichung, die die gemessenen Signalstärken in Verbindung zur effektiv vorhandenen Konzentration des NMR-Tracers setzt, läßt sich aus der jeweiligen Signalstärke die Konzentration bestimmen. Allerdings ist diese Eichung abhängig vom Meßverfahren, von der porösen Matrix und eventuell auch von gelösten Stoffen, die neben dem NMR-Tracer im Wasser vorhanden sind. Die Parameter des Meßverfahrens wurden so gewählt, daß für eine $CuSO_4$-Lösung in dem verwendeten porösen Medium eine monotone, in guter Näherung lineare Abhängigkeit der Signalstärke von der Konzentration zu beobachten war. Dabei wurden Konzentrationen in einem Bereich zwischen 0 mmol/l und 12 mmol/l verwendet. Diese Konzentrationen reichen aber nicht aus, um die für den hydrodynamischen Versuchsablauf notwendige Dichteüberhöhung gegenüber tracerfreiem Süßwasser zu erzielen. Deshalb wurde zusätzlich zum NMR-Tracer $CuSO_4$ auch noch NaCl in Lösung gebracht und so eine bestimmte Dichte des Salzwassers erreicht. Dies hat zusätzlich den Vorteil, daß die Viskosität des Salzwassers im wesentlichen von NaCl bestimmt ist. Bei der Interpretation der Signalbilder als Konzentrationsverteilung wird dann davon ausgegangen, daß die Cu^{2+}-Konzentrationsverteilung mit der Verteilung der NaCl-Konzentration identisch ist, daß die zwei Salze in Lösung also nicht unterschiedlich mischen oder transportiert werden. Diese Annahme ist gerechtfertigt, da die untersuchten Phänomene im wesentlichen eine Veränderung in Lage und Form der Salz/Süßwasser-Grenzschicht beinhalten, nicht aber eine ausgesprochene Vermischung von Salzwasser mit Süßwasser. Zudem sind die Diffusionskonstanten von Cu^{2+} ($1{,}43 \cdot 10^{-9}$ m^2 s^{-1} bei 25°C) und Na^+ ($1{,}33 \cdot 10^{-9}$ m^2 s^{-1} bei 25°C) in wäßrigen Lösungen sehr ähnlich, ebenso die von Cl^- und SO_4^{2-}.

Die Kalibrierungsmessung (siehe Abbildung 7.1) wurde für Verdünnungsreihen durchgeführt, die auf Lösungen basierten, wie sie in zwei der NMR-Experimente verwendet wurden. Zur Interpolation konnte ein linearer Ansatz verwendet werden, wie dies auch schon in anderen Fällen beobachtet wurde, z.B. für Mn^{2+} [62] oder Ni^{2+} [120]. Somit ist auch eine einfache Übertragung von Signalbildern auf Konzentrationsbilder möglich. Weitere Parameter, die bei den Messungen für stabile Schichtung (bzw. instabile Schichtung) benutzt wurden sind,

- Voxelgröße innerhalb der Schicht: 2,5 mm x 2,5 mm (bzw. 2,34 mm x 2,34 mm)
- Schichtdicke (gleich Voxelhöhe): 4 mm (bzw. 5 mm)

Abb. 7.1: Kalibrierung auf c = 1 Gew.-%

dienten sorgen. Situationen stabiler Schichtung treten in der Natur häufig auf, wenn sich instabile, somit schnell ausgleichende Situationen bereits in die stabilere Situation verwandelt haben.

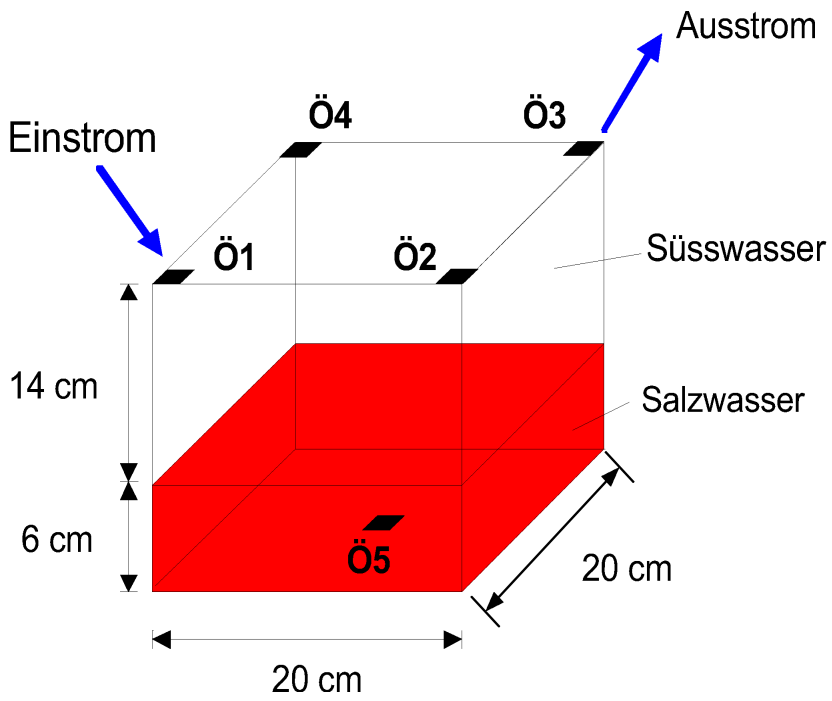


Abb. 7.2: Versuchsaufbau des Saltpool Problems
Im unteren Teil befindet sich eine Schicht aus Salzwasser, das durch die Öffnung Ö5 zugegeben wurde. Darüber befindet sich Süßwasser. Die Grenzschicht ist etwa horizontal und nur wenig vermischt. An zwei der vier Öffnungen im Deckel (Ö1 - Ö4) wird ein Einstrom von Süßwasser bzw. gegenüber ein Ausstrom von Wasser initiiert.

Eine zusätzlich auftretende Strömung verändert allerdings die Situation, insbesondere wenn nach oben gerichtete Strömungskomponenten beteiligt sind. Dies ist in realen Situationen etwa bei artesischen Quellen oder Grundwasserentnahme aus Brunnen der Fall. In dieser Situation stellt sich ein effektives Strömungsverhalten ein, das sich aus dem Zusammenwirken der nach unten gerichteten Gravitationskraft auf dichtere Fluidvolumen und aus aufwärts gerichteten hydraulischen Kräften ergibt. Dabei tritt zudem noch hydrodynamische Dispersion auf. Insgesamt kann die Lösung dieses Problems recht an-

spruchsvoll für eine numerische Berechnung sein. Von ihrem Charakter her ist eine solche Situation ähnlich zum zweidimensionalen Hydrocoin-Problem Level 1, Case 5 (siehe Unterkapitel 6.3).

7.2.1 Aufbau und Ablauf des Experiments

Für NMR-Messungen wurde die oben beschriebene Situation in 3D auf folgende Weise realisiert: Ein würfelförmiger Behälter aus Plexiglas, mit Kantenlänge 20 cm, wurde mit einer möglichst homogenen Schüttung aus Glaskugeln gefüllt. Diese Glaskugeln waren ausgesiebt, so daß der Durchmesser der Kugeln zwischen 1,0 mm und 1,3 mm lag. In guter Näherung kann man von einer uniformen Korngröße von 1,2 mm ausgehen. Die Glaskugeln waren weitestgehend rund und glatt. Durch die besondere Art und Weise des Einfüllens der Glaskugeln wurde verhindert, daß Luftblasen im porösen Medium eingeschlossen wurden. Letztere würden eine NMR-Messung lokal stark stören. Außerdem wurde so eine fast vollständig homogene Verteilung von Porosität und Permeabilität erreicht. Die Kompressibilität des porösen Mediums (und des Behälters) wird als gering angesehen. Es befanden sich vier Öffnungen in den Ecken der Oberseite und eine Öffnung in der Mitte der Unterseite des Behälters. Durch diese Öffnungen konnte über weiterführende Schläuche Fluid zugegeben oder entnommen werden.

Am Anfang des Experiments war das poröse Medium vollständig gesättigt mit entsalztem und entgastem Wasser. In einer ersten Phase wurde durch die zentrale untere Öffnung eine Salzwasserlösung aus einer Mariotteschen Flasche zugegeben. Letztere hält das Druckniveau während der Zugabe konstant. Das verdrängte Süßwasser floß aus den vier oberen Öffnungen aus dem Behälter. Auch hier war das Druckniveau fixiert und bei allen vier Öffnungen identisch. Dadurch ergab sich insgesamt eine zeitlich etwa konstante Zuflußrate für das Salzwasser, da bei den verwendeten Konzentrationen die Veränderung des treibenden Druckgefälles im Verlauf der Zugabe gering war. Nach etwa 12 Minuten wurde die Zugabe von Salzwasser gestoppt. Das poröse Medium war dann zu etwa einem Drittel mit Salzwasser gefüllt. In einer zweiten Phase waren alle Öffnungen für etwa eine halbe Stunde geschlossen. Das Salzwasser floß aufgrund der Dichteunterschiede von der Mitte weiter nach außen und bildete über den gesamten Querschnitt eine fast horizontale Grenzschicht mit dem Süßwasser aus. Die beiden ersten Phasen dienten der

Herstellung einer stabilen Salzwasser/Süßwasserschichtung mit einer Grenzschicht, die nicht zu stark aufgeweitet sein sollte. In der anschließenden dritten Phase wurde dann das zusätzliche Strömungsfeld appliziert. Dabei fand in einer der oberen Ecken ein Zustrom von Süßwasser (auf konstantem Druckniveau) und in der diagonal gegenüberliegenden Öffnung im Deckel eine entsprechende Entnahme (ebenfalls auf konstantem Druckniveau) statt.

7.2.2 Messung der Saltpool Testfälle

Das oben beschriebene Experiment wurde mit zwei unterschiedlichen Salzkonzentrationen der Zugabelösung durchgeführt, nämlich mit c = 1 Gew.-% (Versuch a) und mit c = 10 Gew.-% (Versuch b). Die Werte der sonstigen Parameter wurden identisch gewählt bzw. ergaben sich bei der Versuchsdurchführung als etwa gleich bei beiden Versuchen. Lediglich war bei Versuch b das Druckniveau der Zugabe in der ersten Phase erhöht infolge der größeren Dichte der Zugabelösung. Deshalb wurde - bei etwas kürzerer Zugabezeit - ein etwas größeres, aber vergleichbares Volumen an Salzwasser zugegeben.

7.2.2.1 Meßresultate Versuch a

Das einströmende Süßwasser fließt aufgrund der Geometrie der Anordnung zum großen Teil auf dem kürzesten Weg durch den oberen Bereich des porösen Mediums zum Ausfluß. Ein Teil fließt jedoch auch durch den unteren Bereich. Ohne die Dichteunterschiede im Fluid läge eine reine Potentialströmung vor, und es gäbe auch Bahnlinien, die vom Einstromrand bis zum Boden, entlang der undurchlässigen Berandung und dann zum Auslaß verlaufen würden. Da hier die Salzwasserschicht eine niedrige Konzentration (c = 1 %) hat, ist die Dichte im Vergleich zum Süßwasser nur um 1,3 % erhöht, und die Strömung verhält sich in gewissem Maße ähnlich zum Fall ohne Dichteunterschiede: Das unterschichtete Salzwasser wird langsam durch Süßwasser vom Einlaß her verdrängt und gleichzeitig unterhalb der Entnahmeöffnung nach oben gezogen. Es vermischt sich mit ausströmendem Süßwasser und fließt als leicht salziges Wasser aus. Am Ende des

Abb. 7.4: Durchbruchskurve am Auslaß für Versuch a mit c = 1 %

Experiments befindet sich nur noch ein Teil des Salzes im porösen Medium (siehe Abbildung 7.3). Würde man das Experiment lange genug fortsetzen, so wäre die Konzentration letztlich im gesamten Behälter null.

Dieses Auswaschen des Salzwassers zeigt sich auch in den Durchbruchskurven, die am Auslaß gemessen wurden (siehe Abbildung 7.4). Am Anfang erhöht sich die Konzentration im ausfließenden Wasser, da die Salzwasserschicht unterhalb der Entnahme nach oben gezogen wird (Upconing). Dann nimmt die Konzentration aber wieder ab, da zunehmend Salz aus dem System entfernt und die Salzwasserschicht immer dünner wird.

7.2.2.2 Meßresultate Versuch b

In diesem Versuch zeigt sich ein deutlich anderes Verhalten, da das Salzwasser jetzt eine wesentlich höhere Konzentration (c = 10 %) hat. Die Strömung des einfließenden Süßwassers kann nicht mehr bis zum Boden durchgreifen. Die Salzwasserschicht wird lediglich aufgrund des Druckunterschieds leicht gekippt, und das von oben kommende Süßwasser strömt an der Grenzschicht entlang zum Auslaß. Dabei wird durch Diffusion und Dispersion Salz in die Strömung gemischt und in einer Fahne zum Auslaß getragen. In dieser Fahne sind die Konzentrationen aber deutlich geringer als in der Salzwasserschicht (siehe Abbildung 7.5).

Die gemessenen Durchbruchskurven variieren in diesem Fall etwas von Messung zu Messung. Dies zeigt auf, daß diese Strömungssituation sehr sensitiv auf kleine Änderungen der Parameter reagiert. Die Durchbruchskurven zeigen ein schwach ausgeprägtes Maximum bzw. einen immer flacher werdenden Anstieg (siehe Abbildung 7.6). Auf jeden Fall ist das Konzentrationsmaximum hier deutlich niedriger als im Versuch a, sowohl in absoluten Konzentrationseinheiten als auch in relativen.

Abb. 7.6: Durchbruchskurven am Auslaß für Versuch b mit c = 10 %

7.2.2.3 Messung von Streichlinien

Mit dem verwendeten Meßverfahren kann lediglich die Konzentrationsverteilung im Gebiet bestimmt werden, nicht aber Drücke oder Bahnlinien. Um dennoch Informationen über das Strömungsfeld zu bekommen, wurde für die Versuche a und b des Saltpool-Testfalls jeweils eine zusätzliche Messung mit einer anderen Vorgehensweise vorgenommen. Ziel war es, die Bewegung von einzelnen, markierten Fluidvolumina sichtbar zu machen, und so Aussagen über den Verlauf von Bahnlinien zu bekommen.

Meßverfahren, Versuchsaufbau und Vorgehen wurden analog zu den früheren Versuchen gewählt, allerdings wurde das einströmende Salzwasser nicht mit dem NMR-Tracer Cu^{2+} markiert. Stattdessen wurde am Ende der zweiten Phase kleine Volumina mit $CuSO_4$-Lösung durch spezielle Öffnungen im Behälter in verschiedene Stellen des porösen Mediums eingespritzt. Die markierten Fluidvolumina hatten im Bereich des Salzwassers durch zusätzliches NaCl eine Dichte, die etwa derjenigen des umgebenden Salzwassers entsprach. Im Bereich des Süßwassers war die Dichte der markierten Fluidvolumina allerdings infolge des $CuSO_4$ größer als diejenige des umgebenden Süßwassers. Aufgrund verschiedener experimenteller Schwierigkeiten ließen sich keine einzelnen Bahnlinien aus den Versuchen gewinnen. Der Eindruck aus den gewonnenen Bildern (Abbildung 7.7) bestätigt aber die Vorstellungen über das Strömungsfeld bei den beiden Versuchen. Insbesondere war zu erkennen, daß beim Versuch b (mit größerer Dichte des Salzwassers) die Strömungsgeschwindigkeiten im Bereich des Salzwassers minimal im Vergleich zum darüberliegenden Süßwasser sind. Während nach einer Stunde die im Süßwasserbereich gesetzten Tracerpunkte den Behälter bereits verlassen haben, sitzen die Tracerpunkte im Salzwasserbereich praktisch noch an ihrer Startposition. Das Strömungsfeld greift in diesem Fall also nicht bis zum Boden des Behälters durch. Um aber eine walzenförmige Bewegung in diesem Bereich, entsprechend den Rechnungen, explizit nachweisen zu können, waren die zurückgelegten Bahnlängen zu klein.

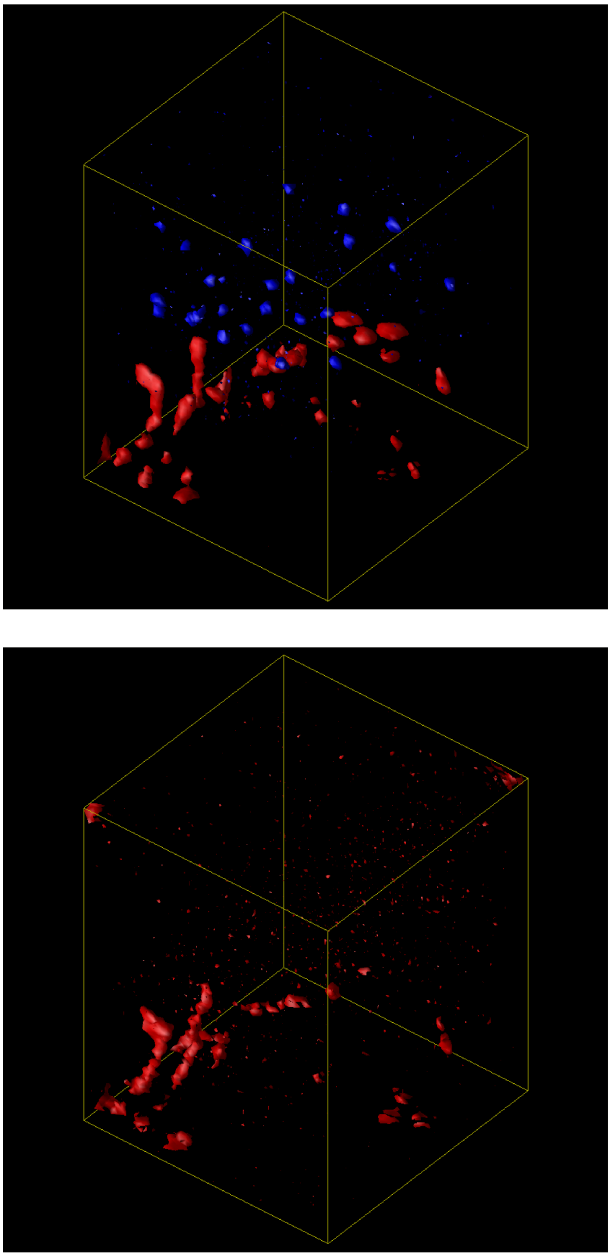


Abb. 7.7: Markierte Fluidvolumina für Versuch b
oben: vor der dritten Phase, unten: nach einer Stunde der dritten Phase
Der Auslaß befindet sich links oben (blau im Süßwasser, rot im Salzwasser).

7.2.3 Simulation der Saltpool Testfälle mit d^{3}f

7.2.3.1 Modellierung

Eine erste Rechnung mit d^{3}f, Version 1.5, bezog sich lediglich auf die erste Phase des Versuchs a. In weiteren Rechnungen wurde dann die dritte Phase von Versuch a und Versuch b mit der Version 1.15 von d^{3}f simuliert. Die entsprechenden Parameter sind in Tabelle 7.1 aufgelistet, die Durchflüsse entsprachen den gemessenen Werten.

Tabelle 7.1: Modellparameter zur Simulation der Experimente a und b

Parameter	Wert
Permeabilität k	$9{,}8 \cdot 10^{-10}$ m^2
$\frac{\Delta\rho}{\rho_0}$ Versuch a	0,0071
$\frac{\Delta\rho}{\rho_0}$ Versuch b	0,0726
Porosität ϕ	0,372
longitudinale Dispersivität α_L	$1{,}2 \cdot 10^{-3}$ m
transversale Dispersivität α_T	$1{,}2 \cdot 10^{-4}$ m
effektive Diffusionskonstante D_m	$8{,}7 \cdot 10^{-10}$ m^{2}s^{-1}

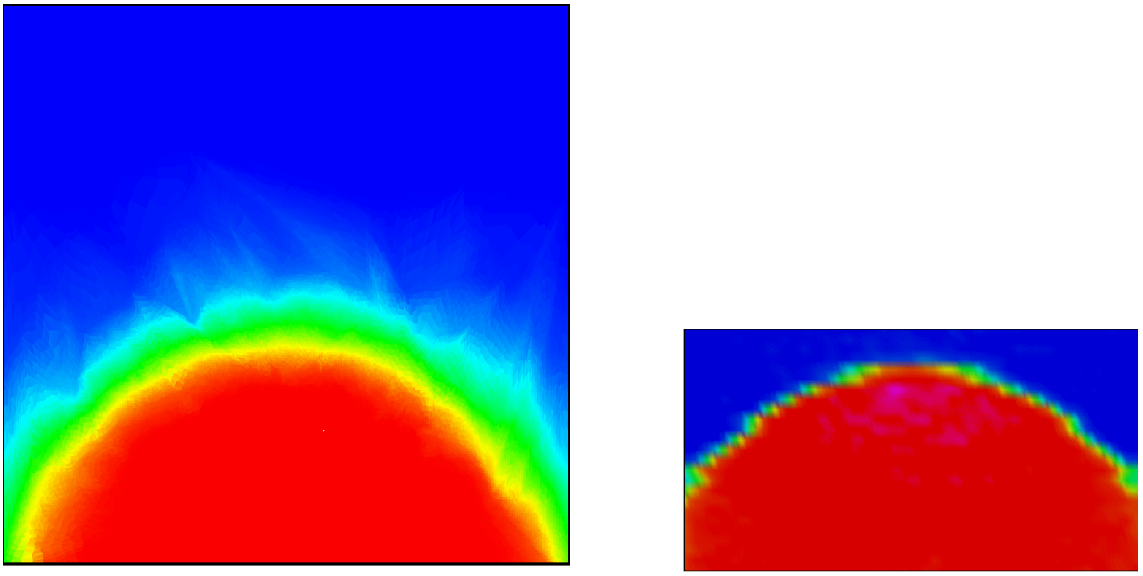
Bei der Rechnung zur ersten Phase wurde die Fähigkeit von d^{3}f benutzt, das Gitter adaptiv anzupassen und so mit geringer Knotenzahl die Vermischungszone relativ fein diskretisieren zu können. Die kleinsten Elemente entsprachen einer fünffachen Verfeinerung des Ausgangsgitters mit 365 Knoten. Da bereits das Ausgangsgitter sehr kleine Elemente enthielt, um die Zugabe- und Entnahmeöffnungen wiedergeben zu können, variierte die Gitterweite des Ausgangsgitters im Gebiet erheblich. Die Gesamtknotenzahl veränderte sich während der Rechnung infolge der adaptiven Gitteranpassung und betrug am Ende 31 423 Knoten. Die zentrale Zugabe in der Bodenmitte wurde als Fluidfluß auf einer Fläche von 36 mm^2 vorgegeben. Die Konzentration war hier auf c = 1 festgelegt. An den vier Auslaßöffnungen im Deckel mit einer Fläche von je 4 mm^2 war ein festes, einheitliches Druckniveau vorgegeben und die Konzentrationsrandbedingung war entsprechend dem

Austritt von Fluid jeweils eine Ausstromrandbedingung. Zu Anfang war die Konzentration im gesamten Gebiet $c = 0$. Die Dichte wurde als linear von der Salzkonzentration abhängig spezifiziert, die Viskositätsabhängigkeit in einer Form, die die experimentellen Werte gut beschreibt (siehe Unterkapitel 4.5.2, Viskositätsfunktion: real). Die Rechnungen zur dritten Phase wurden mit nichtadaptivem Gitter durchgeführt. Das verwendete Gitter hatte 70 785 Knoten und ging aus einem Grobgitter mit 12 Knoten durch globale fünffache Verfeinerung hervor. Das Diskretisierungsschema war ein Galerkin-Verfahren („no modifications“). Als Anfangsbedingung wurde jeweils eine Unterschichtung von Salzwasser unter Süßwasser mit horizontaler Grenzschicht ohne Vermischungsbreite vorgegeben. Die Menge an Salzwasser im Behälter betrug dabei 867,5 ml bei Versuch a bzw. 901,7 ml bei Versuch b entsprechend der Zugabe in der ersten Phase der jeweiligen Versuche. Zugabe und Entnahme waren als punktförmige Quelle bzw. Senke mit dem entsprechendem Volumenfluß vorgegeben. Die Dichteabhängigkeit von der Salzkonzentration wurde als ideal spezifiziert (siehe Unterkapitel 4.5.1), die Viskosität als real, wie in den Rechnungen zur ersten Phase.

7.2.3.2 Ergebnisse

Im Vergleich mit einer entsprechenden Messung zeigt sich, daß die Vermischungszone am Ende der ersten Phase zwar noch breiter als die beobachtete ist, für die geringe Knotenzahl aber zufriedenstellend wiedergegeben wird (siehe Abbildung 7.8). Auch scheint das Salzwasser bei der Rechnung nicht so weit nach außen vorgedrungen zu sein, was aber teilweise auch durch die Differenz der Vergleichszeitpunkte begründet sein kann.

Die stufigen Sprünge an der Flanke der Konzentrationsverteilung der Messung spiegeln die jeweiligen Voxelhöhen wider. Diese vertikale Ortsauflösung der Messung ist auf den Halbbildern der ersten Phase mit jeweils 4 mm merklich gröber als in der zweiten und dritten Phase mit 2,5 mm, da in letzteren Versuchsphasen üblicherweise Vollbilder aufgenommen wurden. Die Simulation der dritten Phase des Versuchs a liefert Resultate, bei denen die Vermischungszone schmal ist, aber das Upconing unter dem Brunnen stärker ausgeprägt ist als in den Messungen, und die Grenzschicht zwischen Salzwasser und Süßwasser schneller zum Auslaß hin wandert als beobachtet (siehe Abbildung 7.9).



bb. 7.8: Vergleich zwischen berechneter und gemessener Konzentration im vertikalen Querschnitt nach 10,3 min bzw. nach 10,9 min der ersten Phase. links: Simulation, rechts: Messung in der unteren Hälfte des Behälters.

Die Konzentrationsverteilung aus einer Simulation des Versuchs b mit Hexaederelementen und Zeitdiskretisierungsschemata höherer Ordnung ist exemplarisch in Abbildung 7.10 dargestellt. Außerdem wird auf den Vergleich der Durchbruchskurven im Unterkapitel 7.4 verwiesen, wo die Ergebnisse einer Simulation des Versuchs b mit Tetraederelementen und Zeitdiskretisierungsschema niedriger Ordnung verwendet werden.

7.3 Fingering

Im Gegensatz zum Testfall des Upconings mit stabiler Dichteschichtung wurde hier der umgekehrte Fall einer instabilen Dichteschichtung betrachtet. Eine Schicht aus salzigem Wasser liegt am Anfang über einer Schicht aus Süßwasser. Diese Situation ist ein labiles Gleichgewicht, da auf das schwerere Salzwasser oben eine größere Gravitationskraft wirkt als auf das leichtere Süßwasser darunter, aber bei absolut horizontaler Grenzschicht ein labiles Kräftegleichgewicht herrscht. Durch kleinste Störungen wird der Austausch des Salzwassers mit dem Süßwasser in Gang gesetzt. Dies erfolgt in 3D in Form

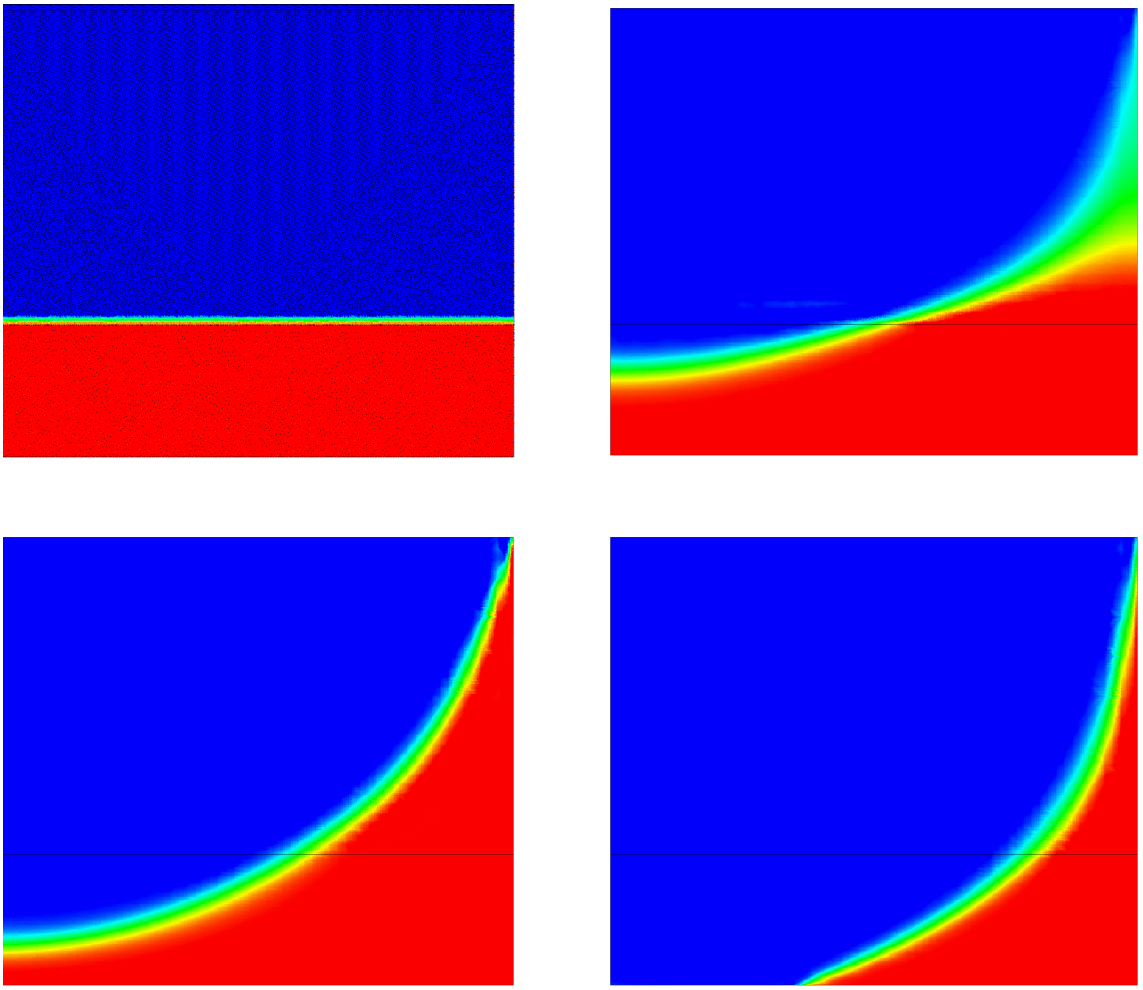


Abb. 7.9: Berechnete Konzentrationsverteilung zu Versuch a Anfangsbedingung der dritten Phase, nach 5,8 min, 21,1 min und 104,2 min. Die schwarze Linie kennzeichnet die anfängliche Lage der Grenzschicht.

von fingerartigen Ausbeulungen der Grenzschicht. Diese Finger sind begleitet von einer walzenartigen Strömungsbewegung um sie herum, da Salzwasserfinger nach unten aufgrund der Kontinuität Süßwasserfinger nach oben erzeugen. Mit der Zeit wachsen die Finger, sowohl Süßwasser- als auch Salzwasserfinger, weiter an. Die Finger können sich gegenseitig beeinflussen. Es kann zur Vereinigung von Fingern zu einem neuen breiteren Finger kommen. Durch Dispersion vermischen sich Salz- und Süßwasser auch in gewissem Maße bei diesen Fließvorgängen, ebenso durch molekulare Diffusion, aber auf der beobachteten Zeitskala bleibt die Grenzschicht zwischen Salz- und Süßwasser schmal.

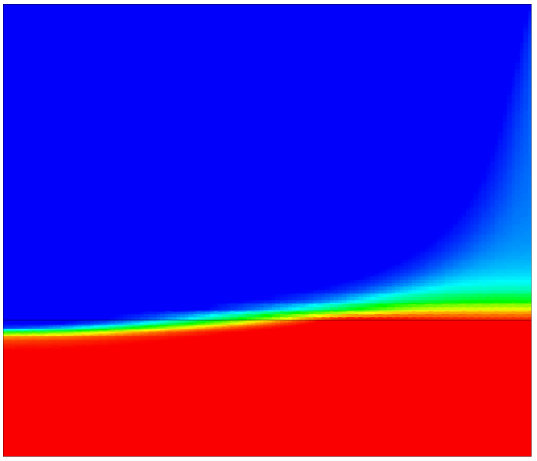


Abb. 7.10: Berechnete Konzentrationsverteilung zu Versuch b nach 12,5 min. Die Berechnungen wurden mit Hexaederelementen und einem Zeitdiskretisierungsschema höherer Ordnung durchgeführt.

Um ein Maß für die Instabilität angeben zu können, werden oft dimensionslose Stabilitätszahlen verwendet. So gibt es für eine Situation eines linearen Konzentrationsgradienten von einem oberen Rand mit c = 1 und einem unteren Rand mit c = 0 die Rayleigh Zahl

$$Ra = \frac{\Delta\rho \cdot k \cdot g \cdot H}{\phi \cdot \mu \cdot D},$$

wobei H die Höhe angibt. Seitlich ist das System dabei unendlich ausgedehnt. Für den hier beschriebenen Fall des Fingerings, ausgehend von einer instabilen Überschichtung mit sehr schmaler Grenzschicht, ist die Rayleigh-Zahl nicht adäquat, da hier nicht von einem linearen Konzentrationsgradienten in der Grenzschicht ausgegangen werden kann. Geht man aber dennoch näherungsweise davon aus, so gibt die Rayleigh-Zahl für Breiten der Vermischungszone größer als einige Millimeter an, daß die Situation nicht stabil ist. Faktisch ist das System aber von Anfang an instabil. Solche Situationen treten auch in der Natur auf, meist allerdings begleitet von einer zusätzlichen Querströmung von Salz- und/oder Süßwasser. Es handelt sich dabei charakteristischerweise um instationäre Probleme, wenn etwa eine Salzfront, die auf einer undurchlässigen Schicht vordringt, ein Fenster mit höherer Durchlässigkeit oder das Ende der undurchlässigen Schicht er-

reicht und dort nach unten sinkt. Auch bei Sickerung aus Deponien können Fahnen hoher Dichte entstehen, die dann unter Bildung von Fingern absinken. Die Verbindung des Phänomens mit heterogenen Bodeneigenschaften wurde in diesem Testfall auch untersucht, indem in den homogenen Behälter ein Bereich mit erhöhter Durchlässigkeit eingebaut wurde. Dieser kann bis zu einem gewissen Maße auch das Wachstum der Finger kanalisieren. Im durchlässigeren Bereich ist die Entstehung von Fingern im Vergleich zum geringleitenden Teil begünstigt, da die Instabilität größer ist. Die instabile Situation ist sowohl von der Phänomenologie als auch von der numerischen Simulation her sehr anspruchsvoll. So müssen für die Simulation anfängliche Störungen verwendet werden, die geeignet sind, Finger zu initiieren. Diese Störungen sollten aber andererseits den physikalischen Charakter der Fingerentstehung nicht verfälschen. Idealerweise sollten sie sogar explizit die durch die experimentellen Bedingungen verursachten Störungen nachbilden. Zum Vergleich mit Rechnungen ist die Konzentration (an einem bestimmten Ort) über der Zeit oder die momentane Konzentrationsverteilung im Raum nicht geeignet, da die anfängliche Fingerentstehung nicht deterministisch bestimmt ist. Statt dessen müssen charakteristische Größen gefunden und bestimmt werden, die einen Vergleich der Rechenergebnisse mit dem gemessenen Verhalten erlauben. Dieses sind etwa Fingerwachstumsgeschwindigkeit oder Fingerbreite bzw. Fingeranzahl. Ansonsten kann das berechnete Verhalten nur auf einem qualitativen Niveau mit den Messungen verglichen und beurteilt werden.

7.3.1 Aufbau und Ablauf des Experiments

Der Versuchsbehälter war ein Würfel mit innerer Kantenlänge von 24 cm. Es gab keine Zugabe- oder Entnahmeöffnungen. Bis auf den Einbau eines besser durchlässigen Bereichs in der Mitte des Behälters (quaderförmig, 4 cm Kantenlänge horizontal, 16 cm vertikal) entsprach der Aufbau demjenigen des Upconing-Experiments. Zur Präparation der anfänglichen Salzwasserschicht war eine dünne Plastikmatte in einer Höhe von 16 cm über dem Boden des porösen Mediums eingesetzt. Diese wurde zum Start des Experiments seitlich herausgezogen.

7.3.2 Messung der Fingering Testfälle

Ein erstes Experiment wurde mit einem Durchlässigkeitskontrast von etwa 3 durchgeführt, ein weiteres mit einem Durchlässigkeitskontrast von etwa 5, wobei die Permeabilität in der Einlagerung gleich blieb. Die Konzentration in der Salzlösung betrug insgesamt 3,0 g/l. Beim ersten Experiment wurde die Konzentration in einem horizontalen Bereich um die Grenzschicht gemessen, bei dem zweiten wurde der mittlere Bereich des porösen Mediums über die volle Höhe aufgenommen.

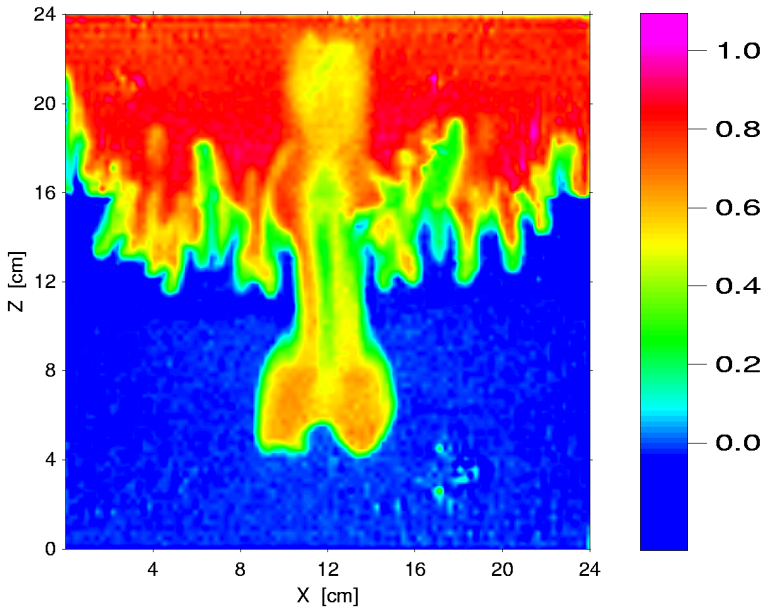


Abb. 7.11: Vertikalschnitt der Konzentrationsverteilung
Die Hauptfinger haben bereits das Ende der Heterogenität erreicht.

Das Verhalten ist in beiden Fällen qualitativ ähnlich: Bereits nach den ersten Minuten sind einzelne Fingeransätze vorhanden. In der Zone der erhöhten Permeabilität erfolgt die Fingerentstehung zuerst und am schnellsten. Dies bedingt, daß nach einiger Zeit die Finger dort am größten sind. Allerdings wachsen auch in den äußeren Bereichen mit geringerer Permeabilität zahlreiche, unregelmäßig verteilte Finger. Dabei wachsen sowohl Salzwasserfinger nach unten als auch Süßwasserfinger nach oben. In der Einlagerung mit höherer Permeabilität stoßen diese Finger dann an die Oberkante des porösen Mediums bzw. das Ende der Einlagerung nach unten an (siehe Abbildung 7.11). Aufgrund

verschiedener Schwierigkeiten sind die Meßergebnisse nicht in vollem Umfang für einen Vergleich geeignet. So werden durch das Herausziehen der Plastikmatte nach vorne wahrscheinlich bereits kleine Störungen der Grenzschicht verursacht, und am hinteren Rand wird eine Süßwasserwalze ausgelöst. Zum anderen können dabei an manchen Stellen Luftblasen eindringen, die dann lokal sowohl eine Konzentrationsbestimmung als auch das Durchströmen vereiteln.

7.3.3 Simulation des Fingering Testfalls mit d^3f

Die Rechnungen wurden mit der Version 1.11 von d^3f durchgeführt. Es wurden insgesamt vier Subdomains definiert, nämlich zwei zur Beschreibung der Salzwasser/Süßwasser-anfangsbedingung, die jeweils wiederum in zwei Bereiche mit unterschiedlicher Permeabilität eingeteilt wurden. Das Grobgitter im Bereich der Grenzschicht wurde durch Verwendung einer Gewichtungsfunktion mit etwas geringerer Gitterweite generiert. Die Anfangsbedingung wurde über ein Wertefeld eingegeben. Dabei wurden innerhalb der Grenzschicht Werte aus einer Gleichverteilung zwischen 0 und 1 als Störung der idealen Anfangsbedingung verwendet. Dieses soll eine Fingerenstehung initiieren. Oberhalb der Grenzschicht waren die Konzentrationswerte gleich 1, unterhalb gleich 0 gesetzt. Das verwendete Raster zur Vorgabe der Anfangskonzentrationen hatte dabei in den beiden horizontalen Richtungen Abstände von 2,4 mm und in der Vertikalen 2,0 mm. Die Permeabilität im äußeren Bereich war entsprechend dem zweiten Experiment auf einen Wert von $3{,}2 \cdot 10^{-10}$ m^2 gesetzt. Da das Modellgebiet vollkommen geschlossen ist, wurde mit der idealen Dichtefunktion (siehe Unterkapitel 4.5.1 und 4.5.2) gearbeitet, um so in der Rechnung Über- oder Unterdrücke durch Volumenänderungen zu vermeiden. Die Viskositätsänderungen mit der Salzkonzentration wurden hier ebenfalls berücksichtigt. Obwohl sie sehr klein sind, sorgen sie für einen prinzipiellen Unterschied zwischen einem Salzwasser- und einem Süßwasserfinger, der sich auf das Strömungsmuster auswirken könnte. Die Rechnung wurde am Anfang ohne Upwindverfahren durchgeführt, um numerische Dispersion zu vermeiden, die eine Entstehung von kleinen Fingern unterdrücken könnte. Ebenso wurde die hydrodynamische Dispersion vernachlässigt. Nach einer simulierten Zeit von 6 Minuten wurde dann mit dem “Partial Upwind”-Verfahren weitergerechnet, um die Ausbildung von numerischen Oszillationen zu verringern.

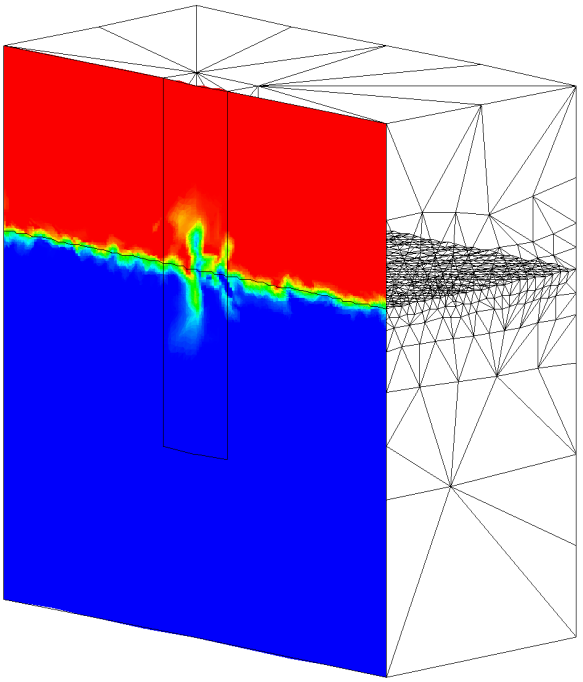


Abb. 7.12: Simulation der Fingerentstehung nach 8,5 min
Gitter und Konzentration im Vertikalschnitt in Farbdarstellung zwischen 0 und 1 (blau: $c \leq 0$, rot: $c \geq 1$)

Das Basisgitter des Mehrgitterverfahrens (Grobgitter) bestand aus 281 Tetraedern, die Gitterweite lag bei etwa 40 mm. Bei den Simulationen wurde die Option zu adaptiver Gitterverfeinerung benutzt, so daß die Grenzschicht mit sehr kleinen Elementen beschrieben werden kann, die anderen Bereiche aber nur auf gröberen Elementen berechnet werden (siehe Abbildung 7.12). Dadurch verringert sich die Gesamtknotenzahl deutlich gegenüber einer Verfeinerung des Gesamtgebietes. Die maximale Verfeinerungsstufe war eine fünffache Verfeinerung des Grobgitters, was einer Gitterweite von etwa 1,25 mm entspricht. Die Gesamtknotenzahl, die im Laufe der Rechnungen infolge der Gitteradaption variierte, betrug bis zu 30 000. Die Simulation zeigt eine sehr schnelle Fingerentstehung in der Einlagerung mit höherer Permeabilität (siehe Abbildung 7.12). Im äußeren Bereich niedrigerer Permeabilität sind Finger nur andeutungsweise zu erkennen, was allerdings nach dieser kurzen Zeit auch nicht anders zu erwarten ist. Im Verlauf der Rechnung traten große numerische Oszillationen bis zu 70 % der Maximalkonzentration (c = 1) auf. Da diese das Fingerwachstum verstärken können, ist nicht klar, inwieweit das Fingering lediglich auf diesen numerischen Fehlern beruht und inwieweit es durch die Anfangsstörungen initiiert wurde.

7.4 Vergleich mit anderen Rechencodes

Zu Vergleichszwecken wurden auch Rechnungen mit den Dichteströmungsprogrammen `Saltflow` [106] und `Feflow` [35] durchgeführt. Beim Henry Problem (siehe Unterkapitel 6.2) wurden auch Ergebnisse von `Marceau` [118] verwendet. Abgesehen vom Henry Problem handelt es sich hierbei um die Simulation der physikalischen Testfälle.

7.4.1 Rechnungen zum Saltpool-Testfall

Beide Versuche wurden mit `Feflow` und `Saltflow` in allen drei aufeinanderfolgenden Phasen des Experiments simuliert. Die hydrogeologischen Parameter waren analog zu denen der Experimente und der d^3f Rechnungen. Allerdings wurden im Detail unterschiedliche Dichte- und Viskositätsfunktionen verwendet, die Gitter und das Diskretisierungsschema waren verschieden und die Zeitschrittweiten variierten. Ohne auf die Details der jeweiligen Modellierung näher einzugehen, werden hier einige Ergebnisse vorgestellt und ansonsten auf [117] verwiesen.

Eine gute Vergleichsmöglichkeit stellt die Konzentrationsisolinie im vertikalen Diagonalschnitt dar. Beim Versuch a ist hierzu zum einen der Zeitpunkt, an dem das Maximum des Upconings erreicht ist, gut geeignet, zum anderen der Zeitpunkt der letzten Messung am Ende des Versuchs, da sich hierbei das Verhalten über den gesamten beobachteten Zeitraum auf die Konzentrationsverteilung auswirkt. Für diesen Versuch werden in Abbildung 7.13 die Lösungen von `Feflow`, d^3f und `Saltflow` mit der gemessenen Isolinie verglichen. Die Lösung von `Feflow` ist in der Flanke der Isolinie praktisch identisch mit der gemessenen Isolinie, am Boden liegt sie nicht ganz so weit links. Das Upconing unter der Entnahme reicht bei den Simulationen generell zu weit nach oben. Da die horizontale Abweichung der Isolinien in diesem Bereich nur gering ist, kann der Unterschied in der Höhe des Upconing eventuell durch eine kleine horizontale Verschiebung infolge der möglichen Positionierungsfehler (siehe Abschnitt 7.4.3) innerhalb der Messung erklärt werden. Allerdings würde dann die gemessene Isolinie insgesamt weiter links liegen, so daß im unteren Bereich die Abweichungen größer wären. Denn hier weichen die d^3f-Resultate, und noch deutlicher die `Saltflow`-Resultate, erkennbar von der gemessenen Isolinie ab. Die bessere Übereinstimmung der `Feflow`-Resultate ist unter Umständen

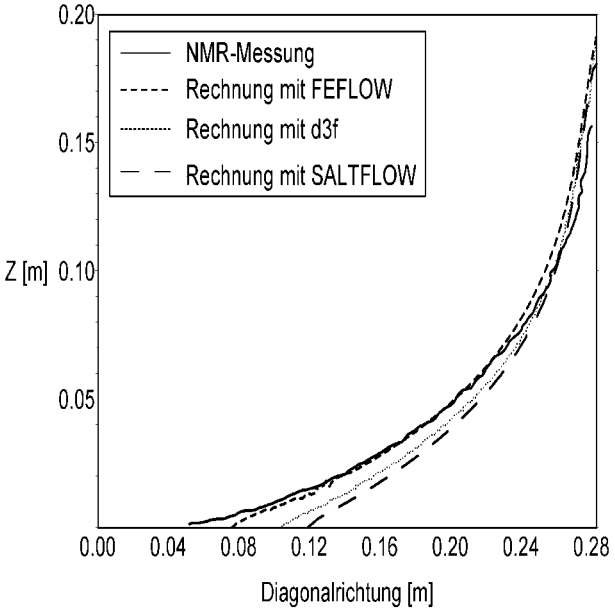


Abb. 7.13: Vergleich der der berechneten Konzentrationsisolinie c = 0,5 in der vertikalen Diagonalebene zwischen Ein- und Auslaß am Ende der dritten Phase von Versuch a: NMR-Messung nach 140,2 min, Rechnung mit `Feflow` auf 315 120 Knoten nach 140,2 min, Rechnungen mit d^3f auf 70 785 Knoten nach 140,2 min und Rechnungen mit `Saltflow` auf 299 975 Knoten nach 139,5 min.

durch das Zeitdiskretisierungsschema höherer Ordnung begründet, da die Lage der Isolinie, insbesondere im unteren Bereich, das zeitliche Verhalten charakterisiert. Die Simulation mit d^3f ist außerdem mit einem Gitter durchgeführt worden, dessen Struktur nicht speziell an die Strömungssituation angepaßt war und das im Vergleich die wenigsten Knoten besaß. Mögliche Gründe für die Abweichung der `Saltflow`-Resultate sind zum einen die Verwendung einer Näherung, die der Boussinesq-Näherung entspricht (da hier der Speicherkoeffizient null war), denn bei der Verdrängung des Salzwassers treten hier auch Strömungen in Richtung von Konzentrationsgradienten auf, zum anderen die Verwendung einer Gitterstruktur, die nicht so gut an die Verhältnisse in der dritten Phase angepaßt werden konnte, wie dies bei `Feflow` möglich war. Für beide Experimente bietet die am Auslaß gemessene Durchbruchskurve eine weitere empfindliche Vergleichsmöglichkeit. Zum einen spiegelt sie integral den Vermischungsprozeß des gesamten Grenzschichtbereichs wider und ist somit auch sensitiv auf numerische Dispersion. Zum ande-

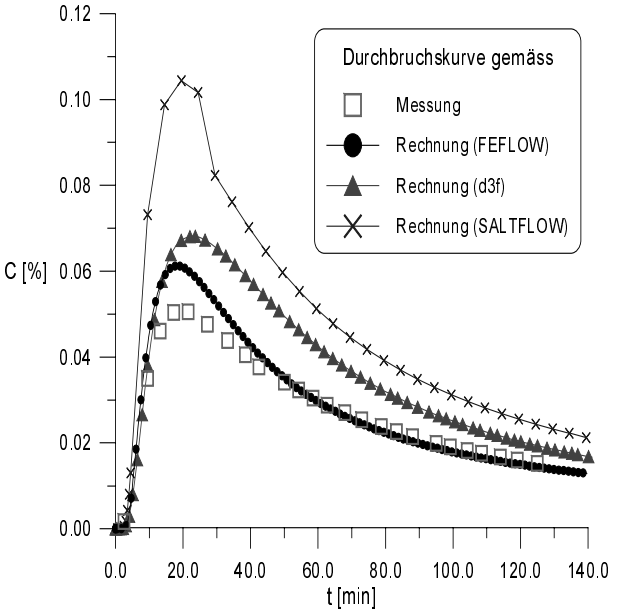


Abb. 7.14: Durchbruchskurven am Auslaß für Versuch a
`Feflow` mit 50 978 Knoten, d^{3}f mit 70 785 Knoten und `Saltflow` mit 299 975 Knoten

ren zeigt sie den zeitlichen Verlauf des Dichteströmungsverhaltens auf. In Abbildung 7.14 ist für den Versuch a zu erkennen, daß die `Feflow`-Simulation auf dem mittleren Gitter GF1 den Austrag von Salz im Maximum etwas überschätzt, aber ansonsten sehr gut reproduziert. Für die `Saltflow`-Rechnungen, bei denen die Konzentration über die vier Auslaßknoten, gewichtet mit der jeweilige Elementfläche und Geschwindigkeit, gemittelt wurden, ergibt sich, daß die Konzentration generell deutlich über der gemessenen liegt. Der Zeitpunkt des Maximums in der Durchbruchskurve ist bei beiden Programmen fast identisch zur Messung. Bei den d^{3}f-Rechnungen wird das Maximum nur wenig später angenommen, wobei diese kleine Verzögerung durch die nicht vermischte Konzentrationsverteilung zu Beginn der dritten Phase begründet sein kann, ansonsten liegt die Durchbruchskurve zwischen den beiden anderen Rechnungen.

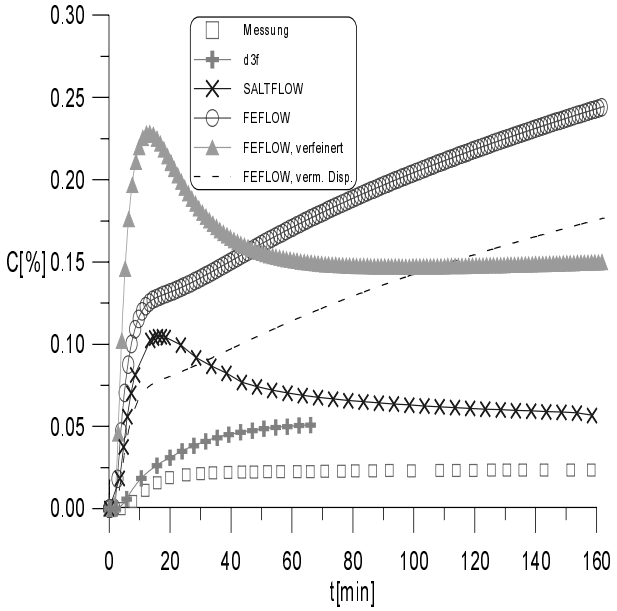


Abb. 7.15: Durchbruchskurven am Auslaß für Versuch b

Auch beim Versuch b zeigt der Vergleich der Durchbruchskurven deutliche Abweichungen auf (siehe Abbildung 7.15): Alle drei Programme ergeben zu große Konzentrationen. Dies ist sicher auch darin begründet, daß die auf den verwendeten Gittern noch auftretende numerische Dispersion in diesem Versuch eine wesentliche Rolle spielt, was insbesondere für die transversale Dispersion an der Grenzschicht zutrifft.

Die `Saltflow`-Simulation ergibt einen Abfall der Konzentrationen nach Annahme eines Maximums, was zumindest qualitativ einen Verlauf darstellt, wie er für kleinere Ausgangskonzentrationen und andeutungsweise auch für diese Ausgangskonzentration festzustellen war (siehe Abbildung 7.6). Die d^{3}f-Simulation dagegen beschreibt den Verlauf der Durchbruchskurve sehr gut. Die Konzentrationswerte sind hierbei zwar einerseits noch deutlich größer als die gemessenen, liegen aber anderseits tiefer als diejenigen der anderen Programme. Die Konzentrationswerte bei den `Feflow`-Simulationen sind wesentlich zu hoch, und die Kurve steigt zudem immer weiter an, ohne erkennbar ein Maximum anzustreben. Eine verminderte Dispersivität reduziert die Größe der Abweichung, nicht aber den Verlauf der Kurve. Wird dagegen die Gitterfeinheit in z-Richtung erhöht (Gitterweite Δz = 0,625 mm im Höhenbereich zwischen 4 cm und 20 cm für die dritte Phase), um die numerische Dispersion in dieser Richtung zu vermindern, so ändert sich die be-

rechnete Durchbruchskurve grundlegend: Am Anfang wird zunächst ein Maximum angenommen, dann fallen die Konzentrationswerte wieder ab. Dieses Verhalten ist ähnlich wie in den `Saltflow`-Rechnungen, allerdings sind die Konzentrationswerte bei `Feflow` noch deutlich größer. Dies zeigt, daß bei der Simulation des Versuchs b die Ergebnisse noch stärker von der Verwendung einer hohen Gitterfeinheit abhängen als bei Versuch a. Erst mit noch deutlich größeren Knotenzahlen, oder zumindest mit deutlich kleineren Gitterweiten im Grenzschichtbereich, kann erwartet werden, daß die beobachtete Durchbruchskurve bzw. das Verhalten insgesamt richtig wiedergegeben werden können.

7.4.2 Rechnungen zum Fingering-Testfall

Mit dem Programm `Saltflow` wurden auch Rechnungen zum Fingering-Testfall durchgeführt (siehe auch [117]). Die Hauptschwierigkeit lag in der Initiierung des Fingerwachstums. Es wurden Rechnungen mit und ohne anfängliche Störungen der Grenzschicht durchgeführt.

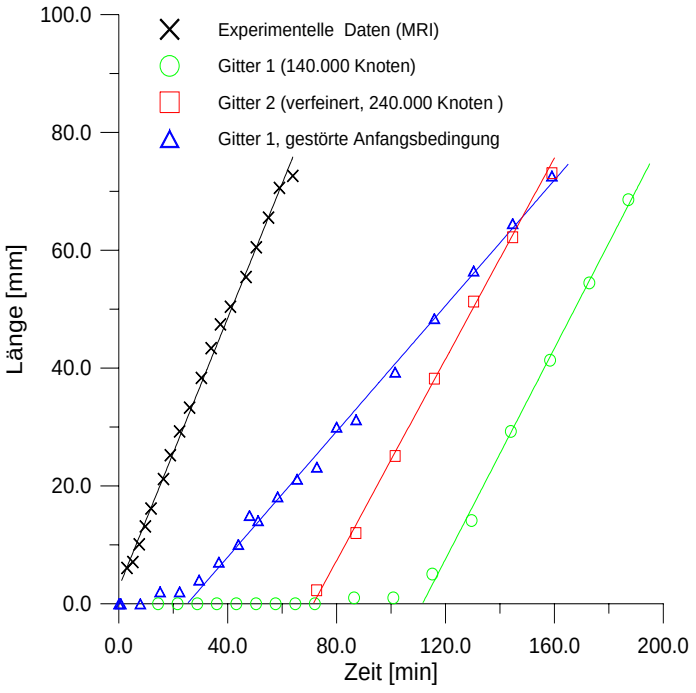


Abb. 7.16: Fingerwachstumsgeschwindigkeit bei `Saltflow`

Zwar konnte in keinem der Fälle ein Fingerwachstum im äußeren Bereich erreicht werden, jedoch bildeten sich im zentralen, durchlässigeren Bereich Finger aus. Diese Finger zeigen im Vergleich mit den gemessenen die richtige Fingerwachstumsgeschwindigkeit. Allerdings tritt eine deutliche Verzögerung bis zum Einsetzen des Fingerings auf (siehe Abbildung 7.16). Diese Verzögerung nimmt bei weiterer Gitterverfeinerung deutlich ab. Ebenso ist die Verzögerung wesentlich geringer für die Rechnung mit anfänglicher Störung der Grenzschicht als in den Rechnungen ohne Störung, wobei dann allerdings die richtige Wachstumsgeschwindigkeit nicht mehr so gut reproduziert wird. Im Vergleich zu diesen Rechnungen läßt sich festhalten, daß d^3f in der Lage ist, ein Fingerwachstum (ohne zeitliche Verzögerung) zu liefern, wobei die Rechnungen dann allerdings von numerischen Oszillationen begleitet sind. Wenn diese reduziert werden könnten, dann sollte sich auch ein Fingering in realistischer Weise in Modellrechnungen ergeben.

7.4.3 Zusammenfassung

Beim Testen von Programmen anhand der Ergebnisse einer Messung muß beachtet werden, wie sich die relevanten Parameter auswirken und wie genau sie bekannt sind. Deshalb wird hier noch einmal kurz auf die wichtigsten Meßparameter und ihren Einfluß auf das Verhalten der Dichteströmung eingegangen:

- Wesentlich für die Entwicklung der Konzentrationsverteilung ist die Dichte. Die wirkliche Dichteüberhöhung γ des Versuchs a liegt zwischen 1,0062 und 1,0076. Ändert man innerhalb dieser Fehlergrenzen die in den Simulationen verwendete Dichte, so hat dies einen kleinen, aber spürbaren Einfluß auf die resultierende Konzentrationsverteilung. Daher sollte eine Rechnung die Meßresultate wiedergeben können, wenn die dabei verwendete Dichteüberhöhung innerhalb dieses Intervalls liegt. Bei dem Versuch b dagegen ist die Dichteüberhöhung besser bekannt, da relativ gesehen weniger NMR-Tracer in Lösung war und der absolute Wert der Dichteüberhöhung wesentlich größer ist. Die wirkliche Dichteüberhöhung γ dieses Versuchs sollte $1{,}073 \pm 0{,}001$ betragen. Die Unsicherheit der wirklichen Dichteüberhöhung sollte sich in Versuch b demzufolge in den zugehörigen Simulationen weniger auswirken als im Fall Versuch a, auch weil die Strömungssituation an sich nicht mehr so empfindlich auf kleine Dichteänderungen reagiert.

- Der Wert der Permeabilität hat beim Saltpool-Problem ebenfalls einen wesentlichen Einfluß. Zwar ist der Durchfluß festgelegt und ergibt sich somit nicht - wie im Falle eines vorgegebenen Druckgradienten - aus der vorliegenden Permeabilität. Aber umgekehrt gibt die Permeabilität bei vorgegebenem Durchfluß den Druckabfall innerhalb des porösen Mediums vor. Die Größe dieses Druckabfalls durch die Strömung legt aber fest, welche relative Größen die Drucküberhöhungen besitzen, die sich aus den Dichteunterschieden ergeben. Davon hängt ab, wie stark sich die Dichteunterschiede auf die Strömung auswirken können. Letztlich sollte sich also eine verdoppelte Permeabilität des porösen Mediums etwa so bemerkbar machen, wie dies eine Verdoppelung des Dichteunterschieds tun würde.

- Durch Adsorption von Cu^{2+} an den Glaskugeln könnte eine Retardierung des NMR-Tracers hervorgerufen werden. Bei den vorliegenden Verhältnissen kann eine solche Adsorption nicht vollständig ausgeschlossen werden. Gegebenfalls beträgt der adsorbierte Anteil an Cu^{2+} maximal einige Prozent vom nichtadsobierten Anteil. Somit könnte der Retardierungsfaktor maximal um wenige Prozent größer als eins sein.

- Die Größe der Dispersivitäten wirkt sich stark auf den Vermischungsprozeß zwischen Salz- und Süßwasser aus, der bei dem Saltpool-Problem wesentlich ist. Deshalb können sie sich auch erheblich auf die Rechenergebnisse auswirken, sofern die Dispersion nicht von numerischer Dispersion dominiert wird. Die Längsdispersivität wurde zwar experimentell bestimmt, es ist aber möglich, daß der wirkliche Wert noch etwas kleiner war. Die Transversaldispersivität ist sogar nur größenordnungsmäßig bekannt. Diese Unsicherheit kann sich - bei ausreichender Gitterfeinheit - besonders bei Versuch b im Vergleich einer Simulation mit der Messung bemerkbar machen, da in diesem Versuch die Transversaldispersion eine besonders große Rolle spielen dürfte.

- Wie am Anfangs dieses Kapitels erwähnt, kann die Positionierung des Bildes relativ zu der wirklichen Ausdehnung des porösen Mediums maximal um eine Voxelbreite abweichen. Dies kann entsprechend beim Vergleich mit Rechenergebnissen berücksichtigt werden. So beträgt die maximale Abweichung auf der Diagonalen 4,7 mm, also 2,4 % der Gesamtdiagonallänge.

- Der angegebene Zeitpunkt eines Bildes ist ein mittlerer Wert, da jedes Bild insgesamt über einen Zeitraum von 3 Minuten gemessen wurde und somit eine Abweichung um 1,5 Minuten denkbar ist. Dies dürfte sich aber nur in den Zeiträumen mit großen Änderungen der Konzentrationsverteilung bemerkbar machen, also in der ersten Phase und zu Beginn der dritten Phase.

8 Dichteströmungen in heterogenen Aquifern

In vielen Aquifern sind bei der Betrachtung von Transportprozessen die Heterogenitäten des Mediums nicht zu vernachlässigen. Ihre Wirksamkeit wird durch ihre Größe und die Permeabilitätskontraste bestimmt. Für die Gorlebener Rinne z.B. werden Permeabilitätskontraste von mehreren Größenordnungen erwartet [47]. Entsprechend starke Heterogenitäten werden auf verschiedenen Längenskalen beobachtet: Jussel [83] beobachtete in Kiesgruben in der Schweiz Linsen von Rollkies mit Längsausdehnungen im Meterbereich und Höhen im Dezimeterbereich, deren Leitfähigkeit um vier Zehnerpotenzen über der des umgebenden Materials liegen. In [93] finden sich ähnliche Variationen der Leitfähigkeit mit Korrelationslängen von über 300 m. Da bei der Modellierung von Aquifern mit mehreren Kilometern Ausdehnung die kleinskalige Heterogenität nicht explizit dargestellt werden kann - und im übrigen auch nicht im Detail bekannt ist -, muß sie in effektiven Ersatzgesetzen parametrisiert werden. Die großräumige Heterogenität muß dagegen explizit aufgelöst werden. Wenn die mittel- oder großskalige Heterogenität nicht aus geophysikalischen Untersuchungen und Bohrungen bekannt ist, so können mit Hilfe von stochastischen Permeabilitätsverteilungen nur wahrscheinlichste Aquiferverhaltensweisen oder Sensitivitäten hinsichtlich Permeabilitätsvariationen bestimmt werden. Daraus ergeben sich drei Vorgehensweisen bei Heterogenitäten:

- **Effektive Gesetze** werden für kleinskalige Permeabilitätskontraste benutzt, deren typische Korrelationslängen unterhalb der Gitterfeinheit liegen.
- **Stochastische Modellierung** wird zur Bestimmung der effektiven Gesetze für den ersten Fall eingesetzt und für großskalige Heterogenität in einem Aquifer, deren räumliche Verteilung nicht bekannt ist.
- **Explizite Darstellung** von unterschiedlichen hydrogeologischen Einheiten werden eingesetzt, wenn diese bekannt und groß genug zur Repräsentation auf dem Rechengitter sind.

In d^3f sind für die letzten beiden Ansätze entsprechende Werkzeuge vorhanden. Das Modell geht von mehreren hydrogeologischen Einheiten, die vom Gitter exakt aufgelöst werden, aus, die ihrerseits eine interne stochastische Permeabilitätsverteilung haben können. Die effektiven Gesetze lassen sich in d^3f für jede geologische Einheit einzeln einsetzen, solange diese immer noch die Form der Gleichungen (4.2), (4.3), (4.5) und

(4.4) haben. Um diese Möglichkeiten auch nutzen zu können, wurden zwei Testfälle entwickelt, die die Fähigkeit von d^{3}f zeigen sollen, mit explizit aufgelösten großskaligen Heterogenitäten und in dem 2D-Testfall mit zusätzlichen Permeabilitätsvariationen innerhalb der geologischen Einheiten umzugehen. Zum anderen wurden systematische Untersuchungen zur Wechselwirkung von Dichteströmungen und Heterogenitäten durchgeführt, die einen Beitrag zum Problem effektiver Parameter leisten.

8.1 Layered-Saltdome - Testfall für mittel- und großskalige Heterogenitäten

In zwei Dimensionen wurde ein synthetischer Testfall (siehe Abbildung 8.1) konzipiert, der die Überströmung eines Salzstockes in einem Aquifer aus drei Einheiten zeigt. Jede dieser Einheiten weist in sich noch eine stochastische Permeabilitätsvariation (siehe Abbildung 8.8) auf. Die Permeabilität variiert innerhalb einer Schicht um ca. eine Zehnerpotenz, im gesamten Gebiet überstreicht sie einen Bereich von drei Zehnerpotenzen. Dieser Testfall beschreibt einen sehr gut leitfähigen Aquifer über einem Salzstock. Dieser Aquifer ist durch ein Fenster (etwas links der Mitte des Gebietes) in der schwachdurchlässigen Trennschicht mit dem oberen Aquifer verbunden. Das Strömungsfeld wird von

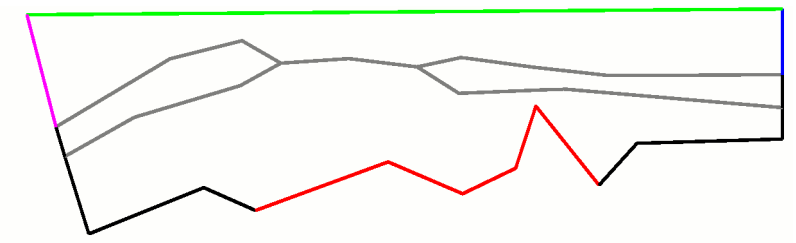


Abb. 8.1: Gebiet und Randbedingung für das Layered-Saltdome-Problem
Bei den Randbedingungen stellt schwarz impermeable Ränder dar, rot die Grenze zum Salzstock, blau eine hydrostatische Druckverteilung und Konzentration 0 als Dirichletbedingung (Einstromrand), grün Grundwasserneubildung und violett eine Austrombedingung mit vorgegebenem Ausstrom. Graue Linien markieren die Grenzen der hydrogeologischen Einheiten. Das Gebiet ist nicht überhöht dargestellt.

dem oberen Aquifer erzeugt. Von rechts kommt Frischwasser aus dem oberstromliegenden Teil des Aquifers und verläßt links das Modellgebiet in die stromabwärtsliegende Fortsetzung dieses Aquifers.

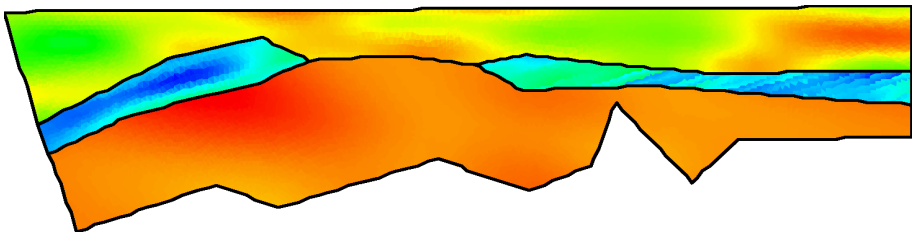


Abb. 8.2: Natürlicher Logarithmus der Permeabilitätsverteilung
Die größten Permeabilitäten sind rot, die kleinsten blau dargestellt. Die untere Einheit hat im Mittel die fünffache Permeabilität der oberen Einheit, die beiden schlechtdurchlässigen Zungen haben im Mittel ein Hundertstel der Durchlässigkeit der oberen Schicht. Die Permeabilitäten wurden isotrop, die Korrelationsfunktion anisotrop modelliert.

Als Anfangsbedingung wurde der salzfreie Zustand dieses Aquifers gewählt und das transiente Verhalten berechnet. Dabei hat d^{3}f seine Fähigkeit bewiesen, solche Probleme zu lösen. Das Verhalten der Lösung sieht intuitiv realistisch aus, wenn - wie bei der in Abbildung 8.3 dargestellten Lösung - die Zeitschritte kurz gewählt werden. Bei größeren Zeitschritten wurden für dieses Problem - und auch bei anderen - Oszillationen in der Salzverteilung beobachtet, wenn die Abhängigkeit der Dispersion von der Geschwindigkeit explizit in der Diskretisierung angesetzt wurde. Die Arbeitsgruppe in Stuttgart hat für dieses Problem für den stationären Zustand Gitterkonvergenz zeigen wollen, doch die Konzentration an einzelnen Punkten änderte sich beim Übergang von 100 000 Knoten zu 400 000 Knoten auf dem Rechengitter noch im Prozentbereich. Die fehlende Gitterkonvergenz läßt sich vielleicht dadurch erklären, daß schmale Walzenstrukturen an den Grenzen zum Salzstock auftreten, die erst bei sehr feinen Gittern aufgelöst werden können. Vielleicht ist diese fehlende Gitterkonvergenz aber auch auf die numerischen Oszillationen in der Dispersion zurückzuführen. Für die zweite Möglichkeit sprächen auch die in Abbildung 8.3 wellenartig oszillierenden Geschwindigkeiten in der Mitte der unteren hydrogeologischen Einheit. Auffällig bei dieser Lösung ist, daß nicht, wie in Hydrocoin

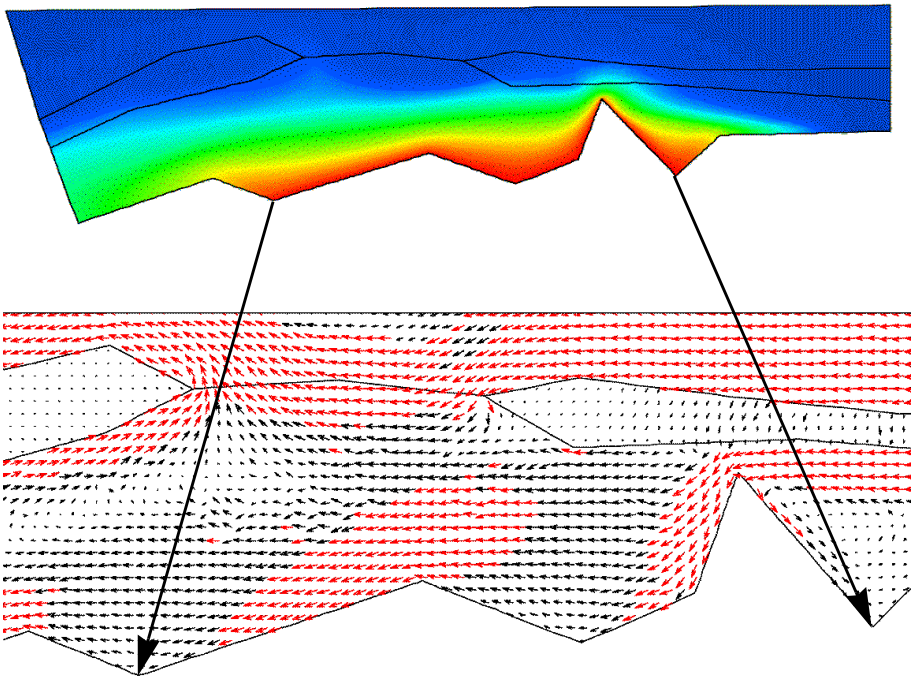


Abb. 8.3: Lösung des Layered-Saltdome-Problems
nach einer dimensionslosen Zeit 1,90. Im oberen Bild ist die Salzverteilung als Farbverlauf dargestellt, blau bedeutet Frischwasser und rot entspricht gesättigter Salzlauge. Im unteren Bild ist ein Ausschnitt aus dem Geschwindigkeitsfeld gezeigt.

Level 1, Case 5 [156], eine globale Walze über dem Salzstock auftritt. Am rechten Ende des Salzstockes ist jedocheine lokale Walze in den Geschwindigkeiten zu sehen. Ob ein Gefälle eines Randstückes zu einem Salzstock immer globale Walzen zugunsten von lokalen Walzen unterdrückt, läßt sich derzeit nicht sagen. Der Unterschied zum Hydrocoin-Testfall kann neben den Geometrieunterschieden auch in den veränderten physikalischen Parametern und der Heterogenität des Mediums liegen.

8.2 Heterogenität bei Meerwasserintrusion

In einem würfelförmigen Gebiet mit zwei quaderförmigen Einbauten wurde ein Testfall für Meerwasserintrusion in drei Dimensionen entwickelt (siehe Abbildung 8.4). Auch in diesem Fall wurde eine salzfreie Anfangsbedingung gewählt und der Aquifer transient simuliert. Bei den ersten Simulationen wurde am Meeresrand statt der Dirichlet-Bedingung für

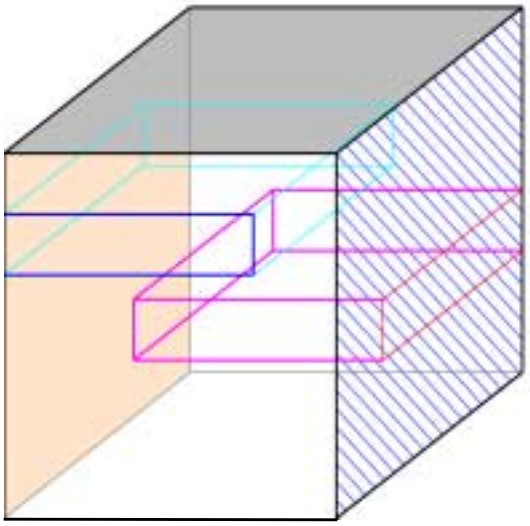


Abb. 8.4: Gebiet und Randbedingungen für das Coast-Problem
Die rot und blau umrandeten Kästen haben eine um den Faktor 100 kleinere Leitfähigkeit als das restliche Gebiet. Blaugestreift ist die hydrostatische Randbedingung zum Meer angezeigt, dort gilt eine Dirichlet-Bedingung mit Meerwasserkonzentration. Grau bedeutet Grundwasserneubildung aus dem salzfreien Niederschlag und braun hinterlegt ist der Rand mit hydrostatischer Frischwasserdruckverteilung und Konzentration null als Dirichletbedingung. Die anderen Randflächen sind impermeabel.

die Konzentration noch die Umschaltbedingung zwischen Ausstrom- und Dirichlet-Bedingung gewählt. Doch diese Simulationen hatten große Konvergenzprobleme. Eine Analyse der Geschwindigkeitsfelder ergab, daß es bei dieser Randbedingung zu verschiedenen transienten Lösungen kommen kann. Eine dieser Lösungen hatte auch einen Ausstrombereich unterhalb der schwachdurchlässigen Schicht zur Meerseite und bei der anderen fand der ganze Ausstrom zur See im oberen Bereich des Randes statt. Für die unstetige Randbedingung kann eine derartige Mehrdeutigkeit ohne weiteres zu Problemen führen. Es ist nicht einmal klar, ob das Problem wohlgestellt ist. Deshalb wurde im weiteren mit der Dirichlet-Bedingung an der Seeseite gearbeitet und der Boundary-Layer im oberen Bereich dieses Randes als lokaler Fehler akzeptiert. Die Lösungen dieses Problems konnten mit d^3f (siehe Abbildung 8.5) mit adaptiven Gittern berechnet werden. Es stellte sich heraus, daß das Problem nicht nur auf der Seeseite mit dem Boundary-Layer

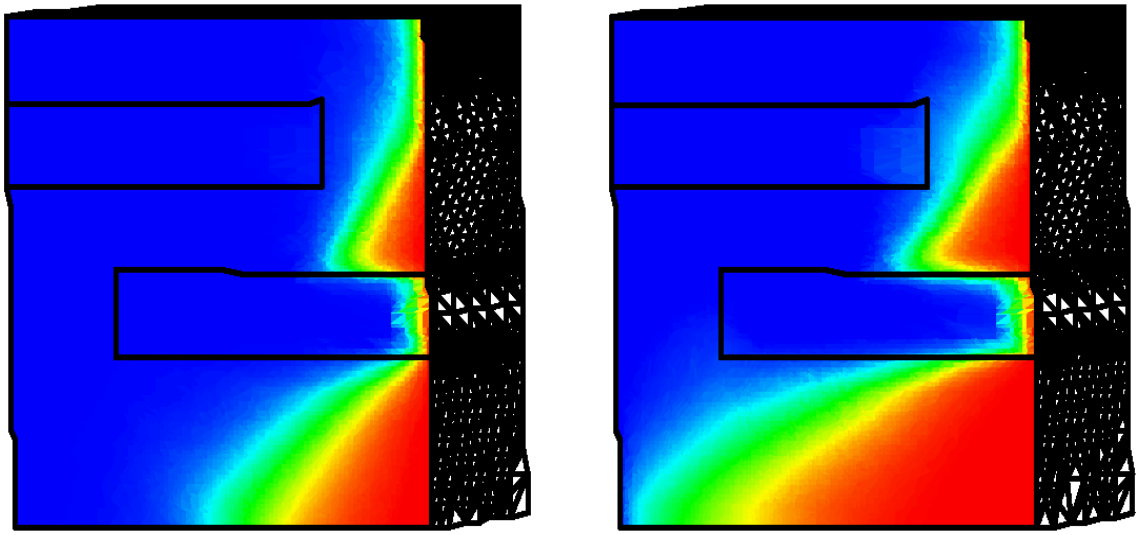


Abb. 8.5: Salzverteilung auf einem Schnitt nach 1 bzw. 2,5 Jahren

am oberen Rand schlecht gestellt ist, sondern auch die Druckunterschiede zwischen der Meerseite und dem landzugewandten Rand zu gering waren, so daß im unteren Aquiferbereich die Salzströmung zum landzugewandten Rand durchbrach. Für dieses Problem hätte also ein größeres Gebiet gewählt werden müssen, damit die Salzzunge ganz im Gebiet bleibt. Ansonsten wird der landseitige Rand auch nur mit einer Umschaltbedingung zwischen Dirichlet- und Ausstromrandbedingung für die Konzentration sinnvoll behandelt.

Von diesen Problemen abgesehen, zeigt dieses Beispiel, daß Salz, wie auch erwartet wird, zuerst in die die durchlässigen Schichten eindringt. Aber Rechnungen, die in Stuttgart durchgeführt wurden, zeigen, daß im stationären Zustand die Salzzunge in den schlechtdurchlässigen Bereichen gleich weit vorgedrungen ist, wie im restlichen Aquifer. Deshalb ließ sich vermuten, daß ein heterogener Aquifer bei Salzwasserintrusion im stationären Zustand eine effektive Dispersion aufweist, die mit der mikroskopischen Dispersionslänge übereinstimmt.

Um diese Theorie zu testen, wurde ein ähnliches Problem der Seewasserintrusion auf einem länglichen, dreidimensionalen Gebiet mit stochastischer Permeabilitätsverteilung entworfen (siehe Abbildung 8.6). Die Randbedingungen sind ähnlich gewählt wie bei dem

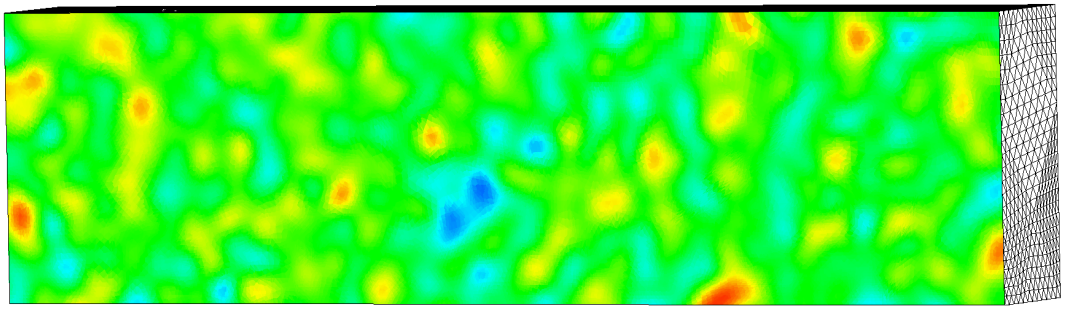


Abb. 8.6: Logarithmus der Permeabilitätsverteilung auf einem Schnitt durch das Gebiet für ein heterogenes Modell eines Küstenaquifers. Die Permeabilität überstreicht vier Zehnerpotenzen; große Permeabilitäten sind rot und sehr kleine blau dargestellt.

oben vorgestellten Problem; die Meeresseite ist in allen Abbildungen links. Die Abbildung 8.7 zeigt die Entwicklung der Salzzunge auf einem Schnitt durch das Gebiet. Durch die Heterogenitäten rauht sich die Front erst auf, aber während des weiteren Vordringens in das Gebiet, nimmt diese Rauhigkeit ab, ohne daß die Breite der Vermischungszone zunimmt. Wenn gleichzeitig mehrere Schnitte durch das Gebiet betrachtet werden, so ist die Salzzunge für die frühen Zeiten in den Schnitten unterschiedlich weit vorgedrungen. Für größere Zeiten nimmt diese Differenz ab. Dieses läßt sich dadurch erklären, daß die eindringende Salzfront sich erst wie ein Tracer verhält und eine große Makrodispersion sieht. Im stationären Zustand aber, wenn Laufzeitunterschiede auf verschiedenen Wegen keine Rolle mehr spielen, wird die Übergangszone wie ein Boundary-Layer durch die mikroskopische Vermischungsbreite bestimmt, d.h. die effektive Dispersionslänge für den stationären Zustand scheint nicht gegenüber der mikroskopischen Dispersionslänge erhöht zu sein. Während zu den Anfangszeiten die Eindringgeschwindigkeit der Salzzunge vergleichbar ist mit der eines homogenen Aquifers mit mittlerer Leitfähigkeit, erreicht der heterogene Aquifer seine stationäre Lösung deutlich später. Durch langsamen Salzeintrag in den schlecht leitfähigen Bereichen verändert sich das Druckfeld in der Umgebung, und die Salzzunge kriecht auch in den besserleitfähigen Bereichen noch weiter in den Aquifer. In diesem Falle war der homogene Aquifer schon nach 2,5 Jahren stationär, der heterogene aber selbst nach 3,7 Jahren noch nicht.

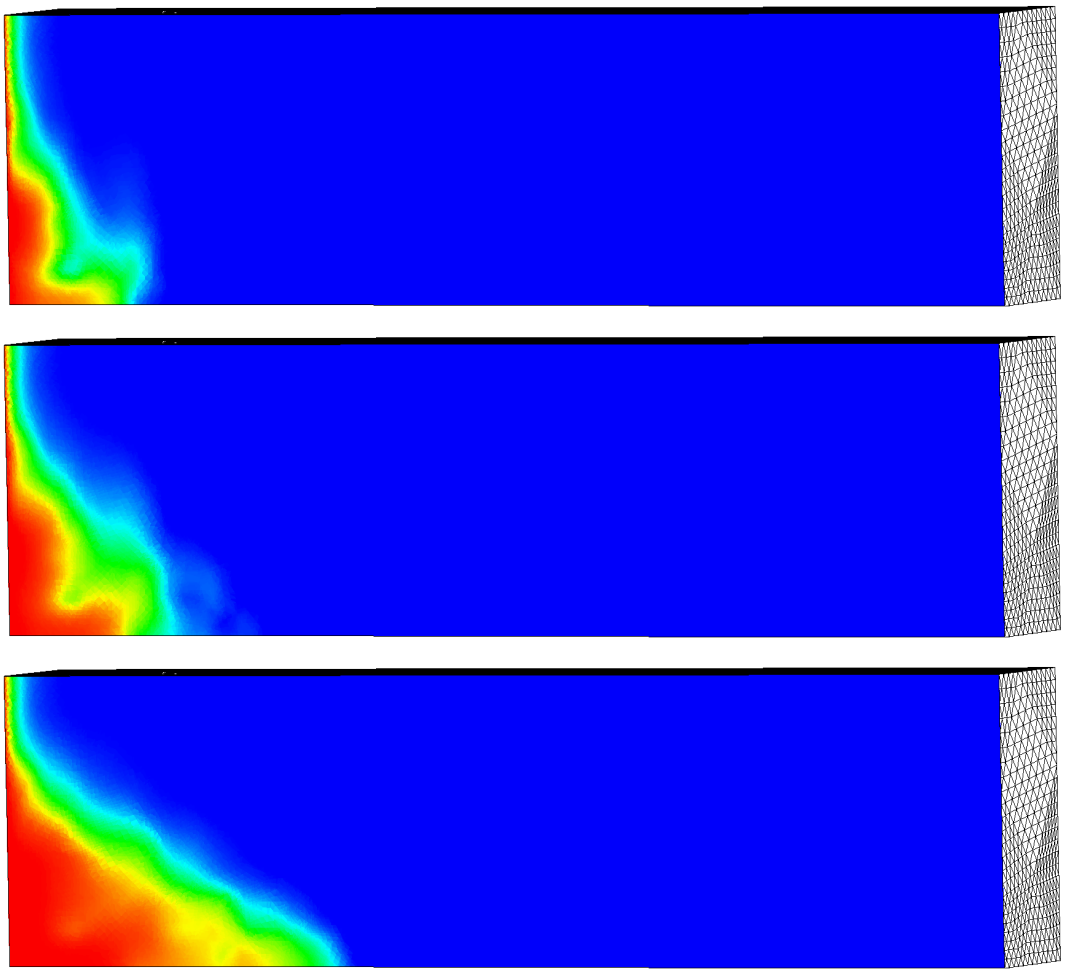


Abb. 8.7: Konzentrationsverteilung nach 1/2, 1 und 3 Jahren für den stochastischen Küstenaquifer auf einem Längsschnitt durch das Gebiet [143].

8.3 Salzfinger in heterogenen Medien

Besonders interessant ist die Interaktion von instabiler Schichtung mit heterogenen Medien. Dieser Fall bereitet der Theorie effektiver Dispersionskoeffizienten als Ersatzeigenschaft für diverse Vermischungsprozesse große Schwierigkeiten, da die entsprechenden Integrale für die effektive Dispersion bei [167] divergieren. Diese Probleme beruhen darauf, daß z.B. translationsinvariante Probleme nichttranslationsinvariante Lösungen aufweisen können (siehe dazu auch Unterkapitel 7.2). Die Lösungen derartiger Probleme weisen in sich Längenskalen auf, die unabhängig sind von der vorgegebenen Geometrie.

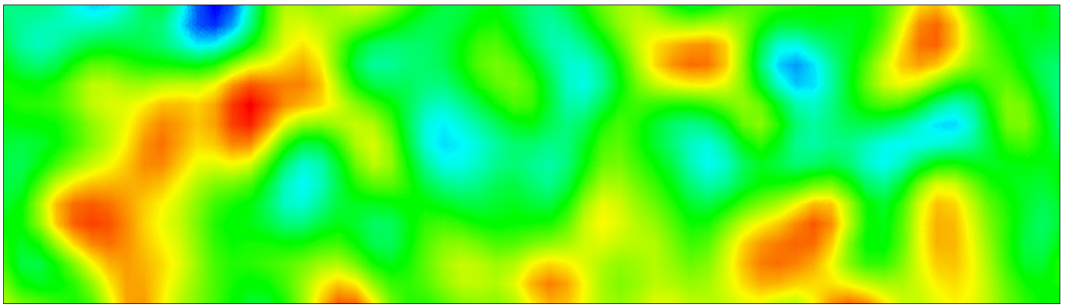


Abb. 8.8: Logarithmische Darstellung der Permeabilitätsverteilung für eine Realisation mit Korrelationslänge 30 m. Gewünschter Mittelwert der Permeabilität war $5{,}5 \cdot 10^{-13}$ m^2, der Mittelwert in diesem Ausschnitt der Realisierung ist $6{,}048 \cdot 10^{-13}$ m^2

Eine solche probleminhärente Längenskala ist die Fingerbreite, die sich im Laufe der Fingerentwicklung durch Zusammenwachsen mehrerer Finger vergrößert (siehe Absatz 6.3.3).

In einem heterogenen Aquifer kann diese Länge kleiner als die Korrelationslänge der Permeabilität sein. In diesem Falle wird durch fortgesetzte Fingervereinigungen die Fingerbreite irgendwann die Korrelationslänge erreichen und übersteigen. Zum anderen könnte die Korrelationslänge des Mediums kleiner sein als die anfänglich auftretenden Finger. Da bei den numerischen Experimenten mit homogenen Medien und Unstetigkeit in der Anfangssalzverteilung keine kleinste Fingerbreite beobachtet werden konnte - sie scheint deutlich unterhalb der verwendeten Gitterweiten zu liegen - läßt sich der zweite Fall kaum untersuchen. Als Ausgangsbasis zur Analyse der Wechselwirkung zwischen Dichtefingern und Heterogenitäten des Mediums wurde das Elder-Problem (siehe Unterkapitel 6.3) gewählt, da neben der Instabilität des Problems hier eine Regularisierung an den äußeren Punkten des Zugaberandes zu finden ist. Somit kann die Wirkung der Heterogenität auf die Salzverteilung mit der Stärke dieser Randfinger verglichen werden. In Abbildung 8.8 ist eine Realisierung aus einem stochastischen Ensemble lognormal-verteilter Permeabilitäten mit dem arithmetischen Mittelwert $5{,}5 \cdot 10^{-13}$ m^2 und einer Varianz $5 \cdot 10^{-26}$ m^4 bei isotroper exponentieller Autokorrelationsfunktion mit Korrelationslänge

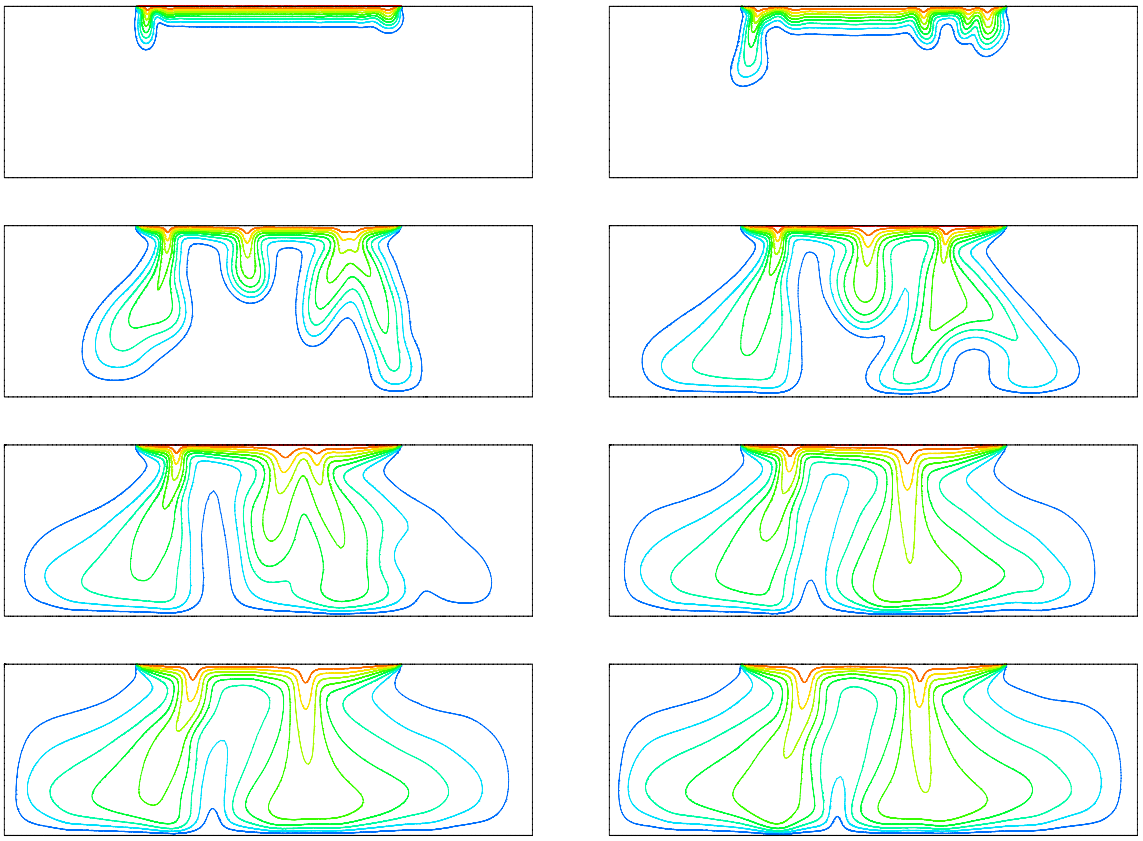


Abb. 8.9: Konzentrationsverteilungen mit stochastischer Permeabilität für 0,52 a, 1,03 a, 3,05 a, 5,18 a, 7,10 a, 10,38 a, 15,37 a und 31,42 a simulierter Zeit

30 m dargestellt. Außer der geänderten Permeabilität sind alle anderen Parameter die gleichen wie im Unterkapitel 6.3. Die resultierende Konzentrationsverteilung in Abhängigkeit von der Zeit findet sich in der Abbildung 8.9.

In der Anfangsphase entstehen die beiden Finger am Rand des Zugabebereiches, wobei der linke auf eine größere Permeabilität fällt als der rechte und dementsprechend schneller wächst. Neben dem rechten Randfinger bildet sich recht früh ein zweiter Finger im lokalen Permeabilitätsmaximum auf dem Zugaberand. Wie die anfängliche Störung im Abschnitt 6.3.3 wächst dieser Finger schneller als der äußere Finger und nimmt diesen in sich auf. Für mittlere Zeiten (drei bis zehn Jahre) ist die Position der Finger nicht so sehr durch die allgemein leitfähigen Pfade gegeben, sondern wird durch die Fingerentstehungsorte am oberen Rand dominiert. Diese hängen - wie schon gesagt - fast nur von

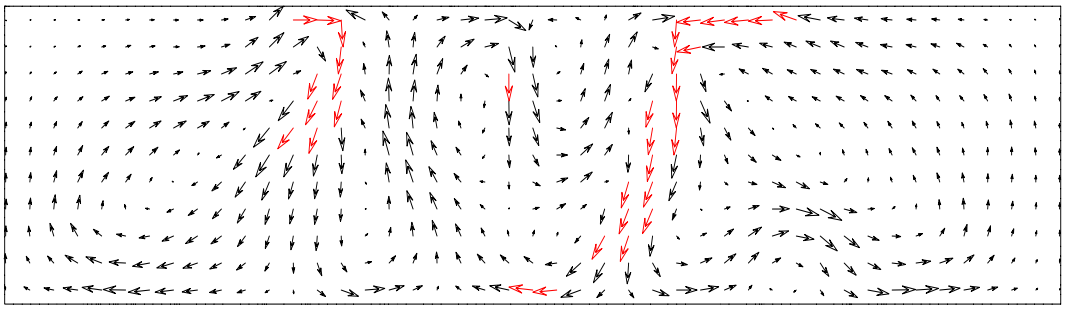


Abb. 8.10: Geschwindigkeitsfeld nach 5,18 Jahren

der Permeabilitätsverteilung am oberen Rand ab. Die Konzentrationsverteilung scheint in diesem Zeitraum relativ unkorreliert zur Permeabilitätsverteilung zu sein. Anders sieht es für die Geschwindigkeiten aus. Die Geschwindigkeiten nach fünf Jahren (siehe Abbildung 8.10) sind in den leitfähigen Bereichen am größten, doch die Geschwindigkeitsrichtung ist unabhängig von der Permeabilität.

In der Abbildung 8.11 ist die Korrelation zwischen der Permeabilität und der Konzentration über die Zeit aufgetragen. Der Wert dieser Korrelationsfunktion zur Zeit Null stellt die Abweichung der mittleren Permeabilität am Eingaberand von der im Gesamtgebiet dar. In der Anfangsphase nimmt die Korrelation zwischen diesen beiden Größen - unterbrochen von einem kurzen Einbruch - zu, d.h. die Finger entstehen hauptsächlich in Bereichen hoher Leitfähigkeit. Später jedoch nimmt die Korrelation deutlich ab; die schon vorhandenen Finger wachsen von ihrem Entstehungsort weiter nach unten und erkunden dabei zufällig schwach- und gutleitfähige Bereiche. Die Schwankungen in der Korrelationskurve spiegeln diese Zufälligkeiten bei der Erkundung wieder. Selbst bei der Annäherung an den stationären Zustand - Zeiten oberhalb zehn Jahren - richtet sich die Salzverteilung nicht besonders stark nach den leitfähigen Bereichen. Die Korrelation zwischen Permeabilität und Salzmassenbruch ändert sich kaum noch. Sowohl die Strömung dichten Fluids nach unten als auch die Frischwasserströmung aufwärts würden gerne die schnellen Pfade bevorzugen, aber für einen stationären Zustand müssen beide auch auf schwächer leitfähige Bereiche ausweichen, so daß die Salzfinger keine nennenswerte Korrelation mit der Permeabilität aufweisen. Dieser Zeitverlauf konnte für mehrere Realisationen des oben genannten Ensembles und für einige Realisationen eines Ensembles mit Korrelationslänge 50 m beobachtet werden. Dementsprechend läßt sich annehmen,

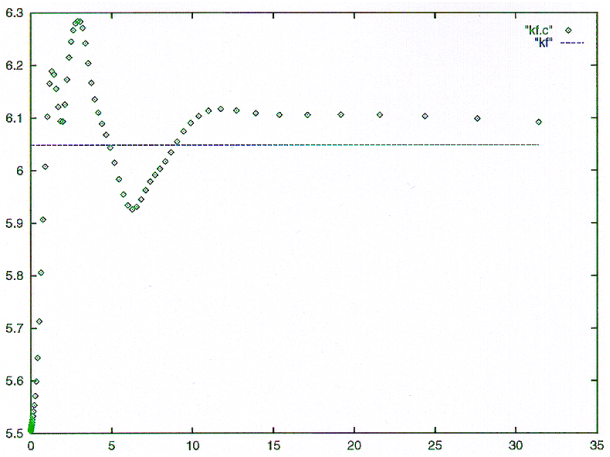


Abb. 8.11: Korrelation zwischen Permeabilität und Konzentration
Die Kurve zeigt die mittlere von der Konzentration gesehene Permeabilität $\frac{\int kc}{\int c}$ in 10^{-13} m^2 gegen die Zeit in Jahren. Die mittlere Permeabilität ist gestrichelt eingezeichnet. Die Abweichung zwischen den beiden Kurven stellt die Korrelation dar.

daß die Fingerentstehung mit der Permeabilitätsverteilung gekoppelt ist - dieser Effekt wird Pinning genannt - aber die so entstandenen Finger entwickeln sich recht unabhängig von der Permeabilitätsverteilung relativ gerade nach unten. Damit scheint die mittel- und langfristige Salzverteilung – zumindest wenn die Quelle größer als die Korrelationslänge ist - nahezu unkorreliert mit der Permeabilitätsverteilung zu sein.

9 Realitätsnahe Testfälle

Typisch für reale Situationen sind ein ausgesprochen großes Verhältnis von horizontaler zu vertikaler Ausdehnung des Gebietes, um Größenordnungen springende Permeabilitäten, lange inhärente Zeitskalen oder komplexe, dreidimensionale Gebietsgeometrien. Im Gegensatz zu den physikalischen Testfällen besteht bei realitätsnahen Testfällen keine oder keine vollständige Vergleichsmöglichkeit der Rechenergebnisse mit Meßdaten. Getestet wird in diesem Fall also die Fähigkeit des Programms, die oben erwähnten charakteristischen Eigenschaften einer realen Situation umzusetzen, sie rechnerisch zu bewältigen und Ergebnisse zu liefern, die plausibel sind und mit gegebenenfalls vorhandenen Meßwerten übereinstimmen.

9.1 Meeresinsel Weizhou mit Meerwasserintrusion

Eine Meeresinsel kann auf natürlichem Wege nur durch Grundwasserneubildung aus Niederschlag eine Zufuhr von Süßwasser erhalten. Dieses Süßwasser legt sich in Form einer Linse auf das Salzwasser auf und strömt letztlich nach außen ins Meer, wobei es sich mit Salzwasser vermischt. Für das durch Dispersion ausgetragene Salzwasser strömt in der Tiefe Salzwasser vom Meer ins Innere der Insel nach. Sind langfristig die hydrologischen Bedingungen konstant, etwa Grundwasserneubildung, Meeresspiegel, Durchschnittstemperatur und Gezeiten, so ergibt sich auf einer Zeitskala von Jahren ein dynamischer, aber stationärer Zustand. Die kurzzeitigen periodischen Schwankungen ergeben in der Regel einen Effekt, der als zusätzliche diffusionsartige Vermischung beschrieben werden kann. Durch Entnahme von Grundwasser aus Brunnen auf der Insel wird der stationäre Zustand verändert. Bei zeitlich konstanter Entnahmerate stellt sich ein neues Gleichgewicht ein, in dem die Süßwasserlinse kleiner als im Ausgangszustand geworden ist und eventuell ein Salzwasseraufstieg unterhalb der Entnahmebrunnen stattfindet. Diese gesamte Situation ist ähnlich der eines Küstengebietes, nur können der dreidimensionale Charakter und die Sensibilität auf Grundwasserentnahmen hier stärker ausgeprägt sein.

9.1.1 Beschreibung von Weizhou

Weizhou ist eine Insel im südchinesischen Merr (Provinz Guangxi). Ihre Form ist - bis auf eine Einbuchtung im Süden - etwa kreisförmig, der Durchmesser beträgt rund 6 km, mit einer Fläche von etwa 24 km^2. Der Teil des Sockels unter dem Meeresspiegel, der mit ins Modellgebiet integriert ist, hat einen Durchmesser von 8 bis 9 km. Der höchste Punkt der obersten Aquiferschicht der Insel liegt im Modell bei 13,6 m ü.N.N., der tiefste Punkt der untersten Schicht bei -758 m ü.N.N.

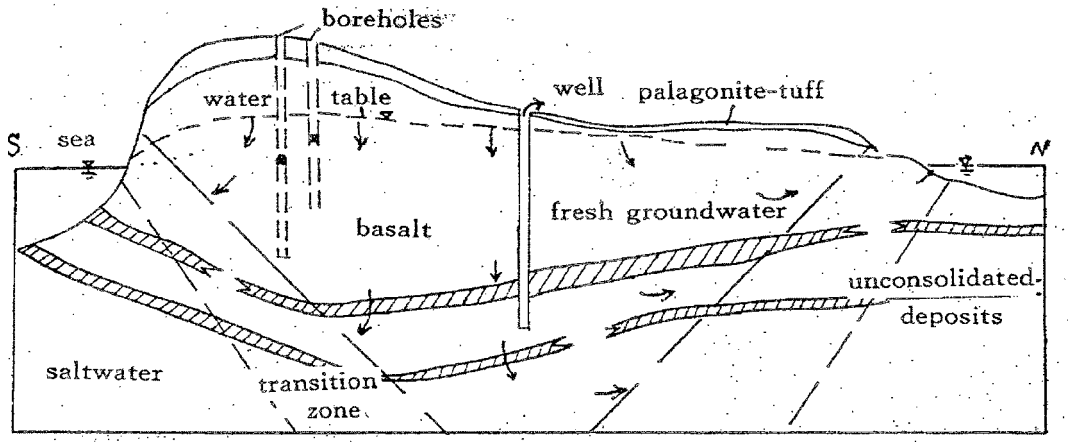


Abb. 9.1: Vertikalschnitt durch Gebietsgeologie nach [102]

Geologisch ist die Insel aufgebaut aus einer nicht wasserführenden Tuffschicht, der eine Schicht aus stark geklüftetem Basalt folgt, die den obersten Aquifer darstellt. Darunter folgen unter einer Tonschicht eine Schicht aus Mittelsand, eine weitere trennende Tonschicht und eine mächtige Feinsandschicht als unterster Aquifer (siehe Abbildungen 9.1 und 9.2). Die Aquiferbasis besteht aus einem geringleitenden Sandstein [102]. Im Bereich der Mittelsande treten die höchsten Permeabilitäten auf. Die Tonschichten haben stellenweise Fenster, die aber nicht einzeln berücksichtigt wurden.

9.1.2 Vorgehen zur Simulation von Weizhou mit d^3f

Die hydrogeologischen Rahmenbedingungen wie Schichtaufbau, Geometrie der Schichten, Parameter der einzelnen Schichten bzw. Variation der Parameter in der obersten Schicht und Randbedingungen basieren auf einem bestehenden, dreidimensionalen Mo-

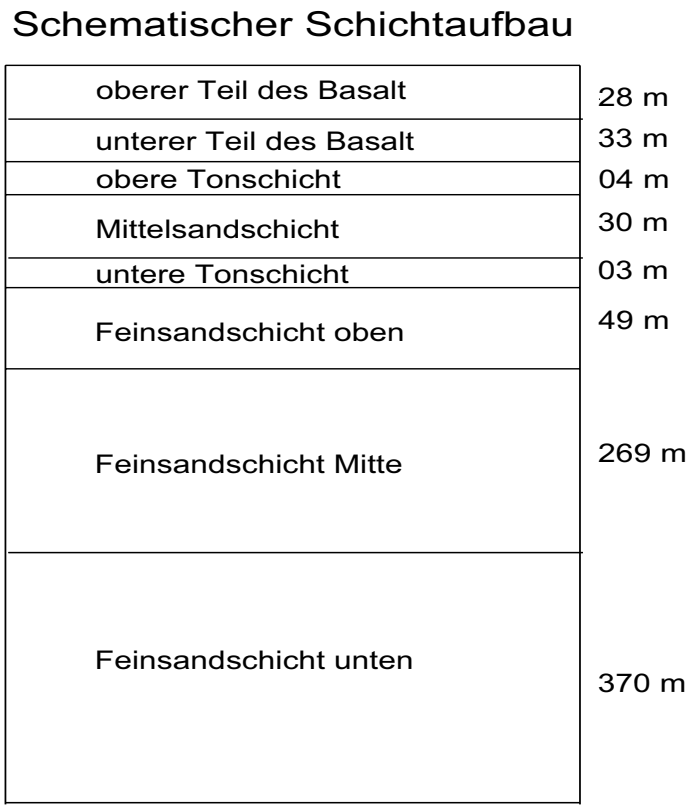


Abb. 9.2: Schichtenfolge im Modellgebiet Weizhou

dell dieser Insel [102]. Die Eichung der Parameter wurde aus diesem Modell übernommen. Der Wertebereich der wichtigsten auftretenden Parameter ist in Tabelle 9.1 angegeben.

Tabelle 9.1: Parameter zur Modellierung von Weizhou

Parameter	Minimalwert	Maximalwert
Permeabilität $k_{horizontal}$	$2{,}315 \cdot 10^{-14}$ m^2	$5{,}787 \cdot 10^{-12}$ m^2
Permeabilität $k_{vertikal}$	$1{,}157 \cdot 10^{-14}$ m^2	$3{,}472 \cdot 10^{-12}$ m^2
Porosität ϕ	0,032167	0,2198
Dispersionslänge α_L	12 m	521 m
Dispersionslänge α_T	2,13 m	13 m

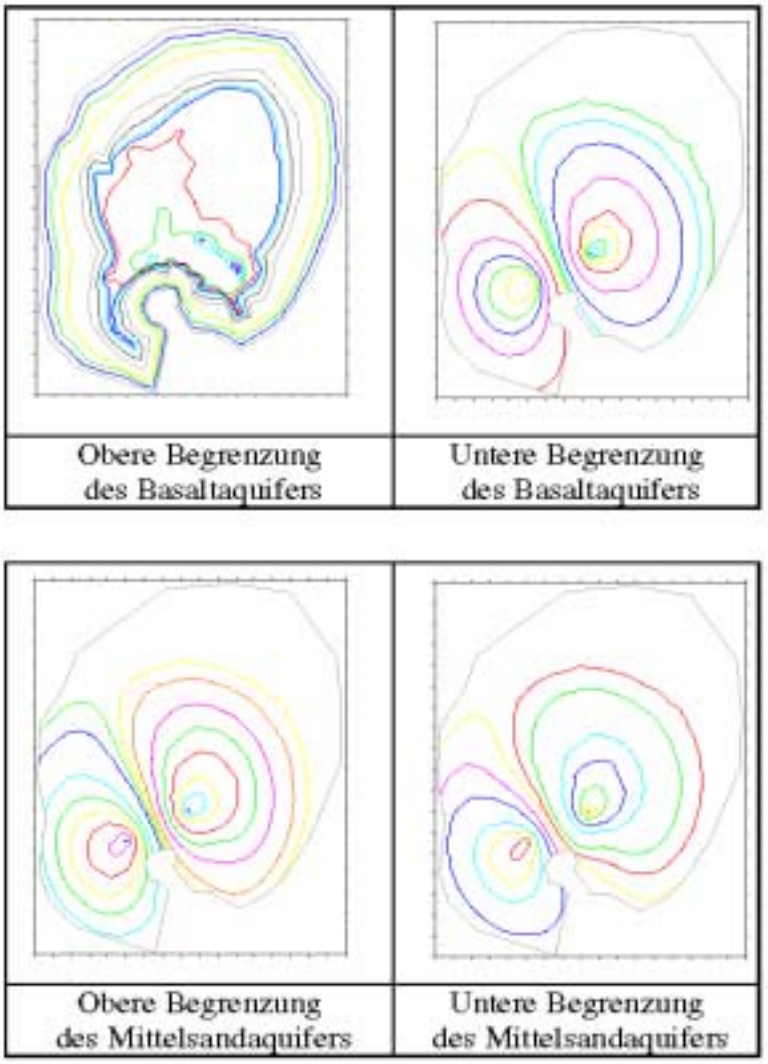


Abb. 9.3: Beschreibung verschiedener Schichten durch Tiefenlinienpläne

Zunächst wurde der Rand des Gebietes auf einen Polygonzug übertragen. Dieser war für alle Schichten gleich, da die seitliche Randfläche als vertikal gewählt wurde. Dann wurde der zweidimensionale Verlauf der Schichtobergrenzen, bzw. Untergrenzen auf ein zweidimensionales Gitter interpoliert. Aus diesen Daten wurde dann eine Darstellung der Tiefenlinien erzeugt, die über `AutoCad` in schichtweise Tiefenlinienpläne im dxf-Format umgesetzt wurde (siehe Abbildung 9.3). Jede Tiefenlinie ist dabei durch einen Polygonzug dargestellt, der entweder geschlossen ist oder auf Punkten des Randpolygonzuges endet. Jeder Tiefenlinie ist eine Kennung zugeordnet, die den Wert der jeweiligen Tiefe angibt. Der Randpolygonzug hat eine besondere Kennung. Als Begrenzungsfläche für

den obersten Aquifer wurde der Grundwasserspiegel aus einer Rechnung mit dem bestehenden Modell verwendet. Dies war nötig, da der wirkliche obere Aquifer ungespannt ist, wohingegen in d^{3}f von einem gespannten Aquifer ausgegangen wird. Deshalb mußte auf diese Weise eine feste Oberfläche für den Grundwasserbereich vorgegeben werden.

Die oberste Schicht ist in Teilgebiete aufgeteilt, innerhalb derer jeweils ein hydrogeologischer Parameter konstant ist. Durch Verschneiden aller Teilgebiete für die verschiedenen Parameter und nach kleineren Vereinfachungen wurde die oberste Schicht letztlich in 14 Untereinheiten aufgeteilt (siehe Abbildung 9.4). In jeder dieser Untereinheiten sind alle hydrogeologischen Parameter und auch die Randbedingungen konstant.

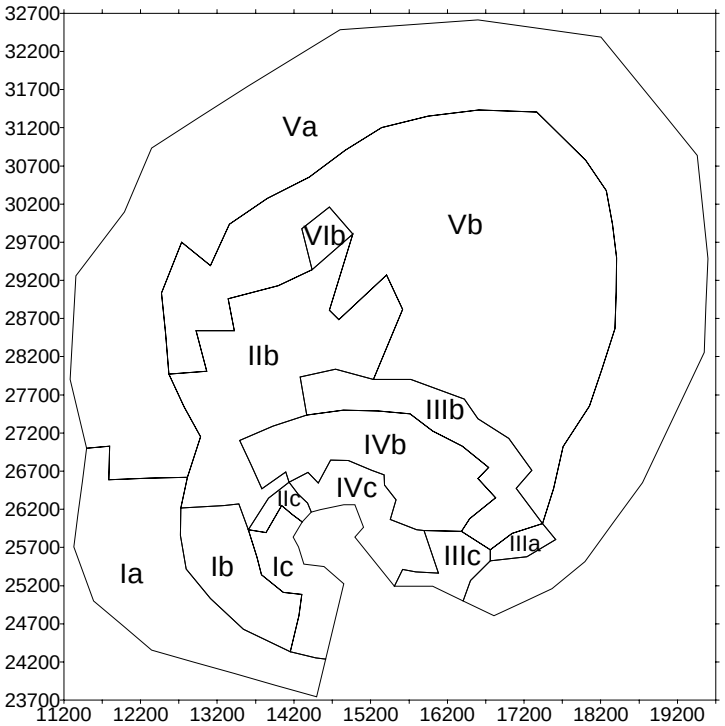


Abb. 9.4: Unterteilung der obersten Schicht in Untergebiete

Dieses Vorgehen, zunächst alle geometrischen Untereinheiten mit einem jeweils konstanten Satz von hydrogeologischen Parametern zu charakterisieren, stellt eine konzeptuelle Besonderheit von d^{3}f dar. Andere Programme erzeugen oft die Dreidimensionalität durch Aufeinandersetzen von Schichten aus Volumenelementen. Bei diesem Vorgehen werden die hydrogeologischen Parameter nach der Gittergenerierung im Prinzip elementweise und schichtweise zugeordnet. In d^{3}f dagegen müssen zuerst die Untereinhei-

ten bestimmt und innerhalb des Preprocessing durch ein Oberflächengitter beschrieben werden. Dann sind sie mit jeweils einem Satz von hydrogeologischen Parametern zu belegen. Auch Anfangs- und Randbedingungen können innerhalb von Subdomains auf bestimmte Weise räumlich veränderlich sein.

Da nicht eine zeitliche Entwicklung, sondern die Berechnung des stationären Zustandes erwünscht war, wurde keine reale Anfangsbedingung für die Salzkonzentration benötigt. Die Anfangsbedingung wurde als flächig nach unten zunehmend angesetzt und über die Vorgabe eines diskreten Konzentrationsfeldes realisiert.

9.1.3 Simulation und Ergebnisse

Das bei d^3f verwendete Grobgitter hatte 2 832 Knoten und 12 715 Elemente. Die Rechnungen wurden auf einem global einfach verfeinerten Gitter mit 22 490 Knoten durchgeführt. Die Permeabilität war anisotrop, nämlich in vertikaler Richtung reduziert im Vergleich zu den jeweiligen horizontalen Permeabilitäten. Das eindringende Meerwasser hatte eine Dichte von 1 023,2 kg m^{-3} und besaß die Maximalkonzentration c = 3.5%, wohingegen die Grundwasserneubildung mit c = 0 eine Dichte von 998,2 kg m^{-3} aufwies.

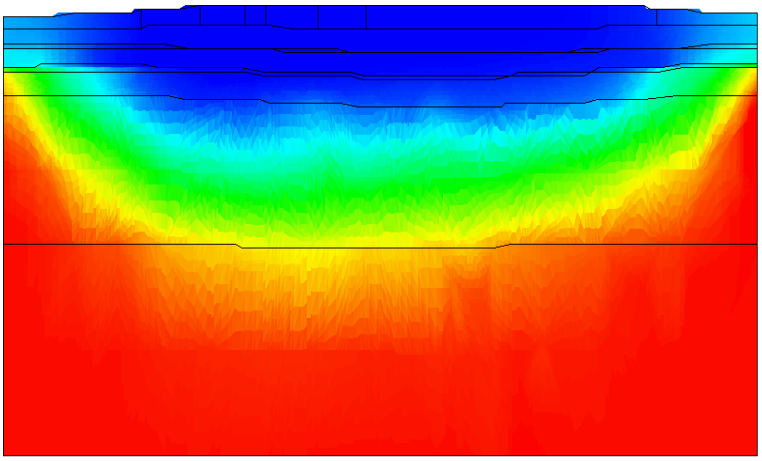


Abb. 9.5: Stationäre Konzentrationsverteilung im Vertikalschnitt von Nordwesten nach Südosten nach Modellrechnungen mit d^3f (in der Darstellung ist die z-Richtung fünffach überhöht).

Es wurde eine linearer Zusammenhang zwischen Dichte und Konzentration benutzt, die Viskosität veränderte sich mit der Konzentration nach der als “real” bezeichneten Funktion (siehe Unterkapitel 4.5.1 und 4.5.2). Ein kleiner See auf der Oberfläche der Insel wurde anstelle der im Modell von [102] verwendeten festen Druckhöhe als Randbedingung mit festem Süßwasserzufluß angesetzt. Dadurch sollte in der Rechnung mit Grundwasserentnahme ein unrealistischer Zufluß ins Gebiet vermieden werden.

Für die Rechnungen wurden das “Partial-Upwind”-Verfahren und die "explizite" Dispersion benutzt. Da zunächst nicht die zeitliche Entwicklung, sondern der stationäre Zustand gesucht war, wurde eine plausible Konzentrationsverteilung als Anfangsbedingung benutzt. Sie wurde über die Vorgabe eines diskreten Konzentrationsfeldes realisiert. Dann wurde gerechnet, bis sich ein stationärer Zustand eingestellt hatte, was nach etwa 200 Jahre simulierter Zeit geschah. Hiervon ausgehend wurden anschließend Rechnungen mit punktförmigen Entnahmebrunnen durchgeführt.

Die Rechnungen mit d^3f ergaben die stationäre Lösung der Salzkonzentrationsverteilung der Meerwasserintrusion, wie sie in Abbildung 9.5 dargestellt ist: Unterhalb der Insel existiert eine Süßwasserlinse, die in einer breiten Vermischungszone in salziges Wasser übergeht.

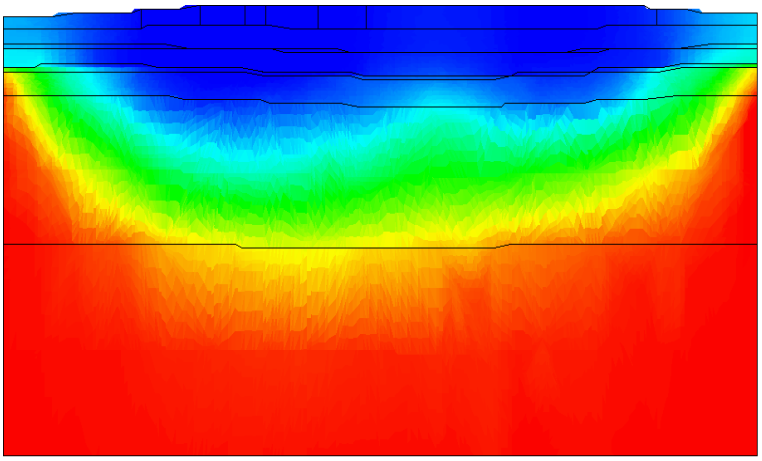


Abb. 9.6: Konzentration 20 Jahre nach Beginn der Grundwasserentnahme in einem einzelnen Brunnen Vertikalschnitt nach Modellrechnungen mit d^3f, in vertikaler Richtung fünffach überhöht dargestellt.

Ausgehend vom berechneten stationären Zustand wurde die Situation einer Grundwasserentnahme untersucht. Dazu wurde verschiedene Realisationen einer Entnahme in ihren Auswirkungen auf die resultierende Salzkonzentration in dem entnommenen Grundwasser verglichen. In der ersten Variante erfolgte die Entnahme in einem Brunnen, in weiteren Varianten dann in zwei bzw. vier Brunnen. Dabei wurde die Entnahmemenge von 7 000 m^3 d^{-1} jeweils gleichmäßig auf die Brunnen aufgeteilt. Die zwei bzw. vier Brunnen wurden auf den Ecken eines Quadrats mit Kantenlänge 1 000 m zentral um den Standort des Einzelbrunnens positioniert. In Abbildung 9.6 ist zu sehen, wie ein Upconing der Süß/Salzwassergrenzschicht unterhalb des Einzelbrunnen stattfindet. Das Upconing in der Variante mit mehreren Brunnen ist dagegen weit weniger ausgeprägt.

Der Vergleich der Durchbruchskurven in den Entnahmebrunnen (siehe Abbildung 9.7) zeigt, daß bei Entnahme in einem Einzelbrunnen der Anstieg der Salzkonzentration im entnommenen Wasser weit stärker ausgeprägt ist als in der Variante mit mehreren Brun-

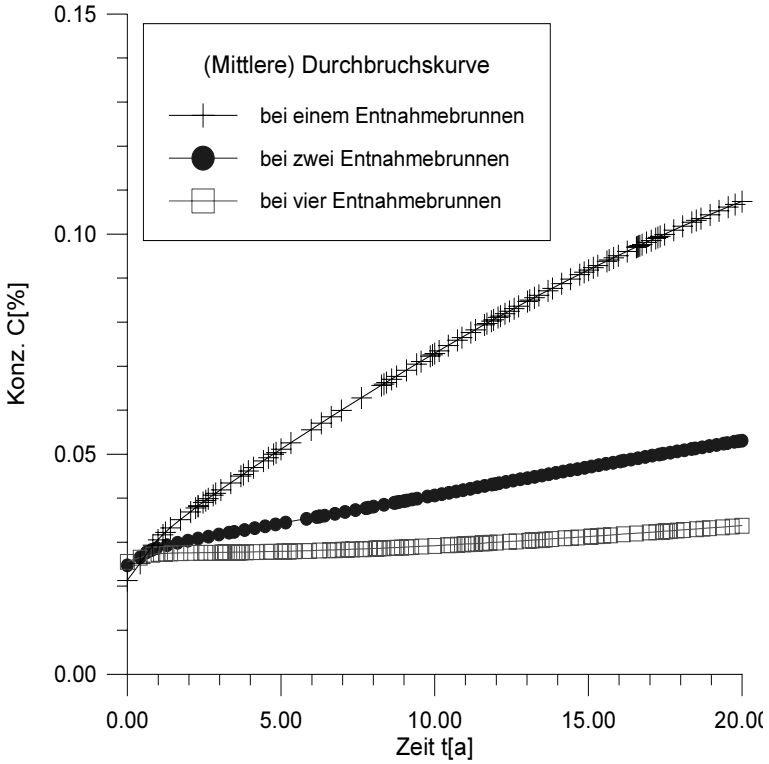


Abb. 9.7: Durchbruchskurven in den Entnahmebrunnen nach Modellrechnungen mit d^3f. Bei der Entnahme aus zwei bzw. vier Brunnen ist die mittlere Konzentration dargestellt.

nen. Bei Verwendung von vier statt zwei Brunnen erfolgt ein weiterer Rückgang in der Salzkonzentration der Durchbruchskurven, aber der Unterschied fällt geringer aus. Somit wird klar, daß durch Erhöhung der Anzahl von Entnahmebrunnen die Qualität des entnommenen Wassers wesentlich verbessert werden kann, auch wenn dieselbe Menge an Wasser gefördert wird. Dies setzt natürlich voraus, daß die Gesamtentnahme deutlich kleiner als die Grundwasserneubildung ist. Das Verhältnis im betrachteten Fall lag bei etwa 1 : 3.

9.2 Palla Road Aquifer (Botswana) mit seitlicher Salzwasserintrusion

Salzeintrag in einen Aquifer kann nicht nur an der Küste oder durch Kontakt zu einem Salzstock erfolgen, sondern auch durch Salzaufstieg aus einem angrenzenden Aquifer mit salinarem Wasser. Solch eine Situation wird hier behandelt. Eine besondere Problematik ist hierbei die Entnahme von großen Wassermengen aus dem Aquifer, da sie zu einem erhöhten Salzeintrag und damit zur Beeinträchtigung der Grundwasserqualität führen kann.

9.2.1 Beschreibung des Palla Road Aquifers

Dieser Aquifer befindet sich im semiariden, südöstlichen Botswana. Das Untersuchungsgebiet erstreckt sich etwa über eine Länge von 50 km und eine Breite von 20 km. Der Aquifer besteht aus einem geklüfteten Sandstein von etwa 80 bis 100 m Mächtigkeit und Durchlässigkeiten im Bereich von $5 \cdot 10^{-12}$ bis $5 \cdot 10^{-15}$ m^2. Im unteren Teil des Aquifers ist die Permeabilität durch Vorhandensein undurchlässigerer Einlagerungen reduziert, weshalb der Aquifer vereinfacht als aus zwei übereinanderliegenden Schichten bestehend angenommen wurde. Die Aquiferbasis wird von einer Schicht aus Tonstein gebildet. Der Aquifer wird zum größten Teil durch eine Basaltschicht von etwa 100 m Mächtigkeit überdeckt. Gespeist wird der Aquifer im Untersuchungsgebiet von einem Zustrom im Westen, Norden und Südosten. Insbesondere das Gebiet nördlich des jetzigen Brunnenfeldes sorgt für einen Zustrom von Wasser guter Qualität, da dort keine überdeckende Basaltschicht vorliegt und eine vergleichsweise hohe Infiltration in den Aquifer stattfindet (siehe auch Abbildung 9.8). Im Osten strömt das Grundwasser an einem Übergang in eine an-

dere geologische Formation aus dem Gebiet aus. In der bestehenden Studie [146] über das Modellgebiet wurde ein zweidimensionales, horizontales Modell des Aquifers im Untersuchungsgebiet erstellt. In diesem Modell wurde die stationäre Strömung (für die Zeit vor den Grundwasserentnahmen) unter Berücksichtigung des Transports von Salz berechnet und dann der Übergang der letzten Jahre zum Verhalten mit Grundwasserentnahmen simuliert. Allerdings wurden Dichteeffekte hierbei nicht berücksichtigt.

9.2.2 Vorgehen zur Simulation des Palla Road Aquifers mit d^{3}f

Da das Gesamtgebiet sehr groß ist, wurde nur der zentrale Teil des Gebietes für die 3D-Simulation mit d^{3}f berücksichtigt. Dazu wurde aus dem Grundwasserhöhenlinienbild des zweidimensionalen Modells (während der Grundwasserentnahmen) ein Gebiet extrahiert, das die Brunnen einschließt, das Randstück mit dem Salzeintrag in den Aquifer enthält und als Ränder ansonsten Grundwassergleichen des Modells oder undurchlässige Ränder besitzt (siehe Abbildung 9.8).

Das so gewählte Gebiet ist geeignet, die Konzentrationsverteilung durch die Salzwasserintrusion mit und ohne Grundwasserentnahmen zu beschreiben. Die Ränder auf den Grundwassergleichen des zweidimensionalen Modells werden als entsprechende Dirich-

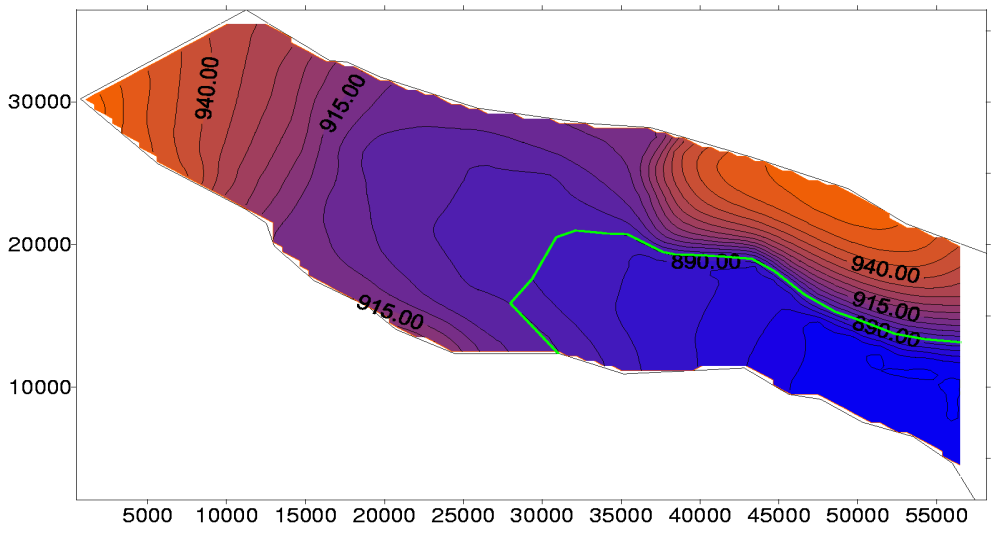


Abb. 9.8: Lage des Modellgebiets für das 3D-Modell (grüne Linie) innerhalb des 2D-Modells (mit Entnahmen)

let-Ränder für den Druck implementiert. Durch die Grundwasserentnahmen ändert sich das Strömungs- und Grundwasserhöhenlinienbild, somit auch in gewissem Maße der Verlauf der im 3D-Modell als fest angenommenen Druck-Dirichlet-Ränder. Aus den Rechnungen mit dem zweidimensionalen Modell ging aber hervor, daß die Veränderungen auch auf den hier gewählten Rändern gering sind. Zur Geometriebeschreibung wurden zunächst - ausgehend von Bohrlochdaten - Profilquerschnitte des Aquifers in Nord-Süd und West-Ost Richtung erstellt. Durch lineares Verbinden der einzelnen Punkte (Aquiferoberkante, Grenze der beiden Aquiferschichten, Aquiferbasis) wurde eine dreidimensionale Aquifergeometrie erzeugt (siehe Abbildung 9.9). Um diese Geometriebeschreibung einfach und direkt ins Geometrieformat von d^{3}f (Datei `geometry`) umsetzen zu können, wurde auf eine Konstruktion von Tiefenlinien verzichtet. Stattdessen wurden die Oberflächen von Hand in Dreiecke eingeteilt und anhand derer die `geometry`-Datei mit insgesamt vier Gebietsuntereinheiten (Subdomains) generiert. Dieses Vorgehen kann unter Umständen auch mittels kommerzieller Programme (z.B. ProEngineer) automatisiert werden, falls entsprechende Schnittstellen geschaffen werden.

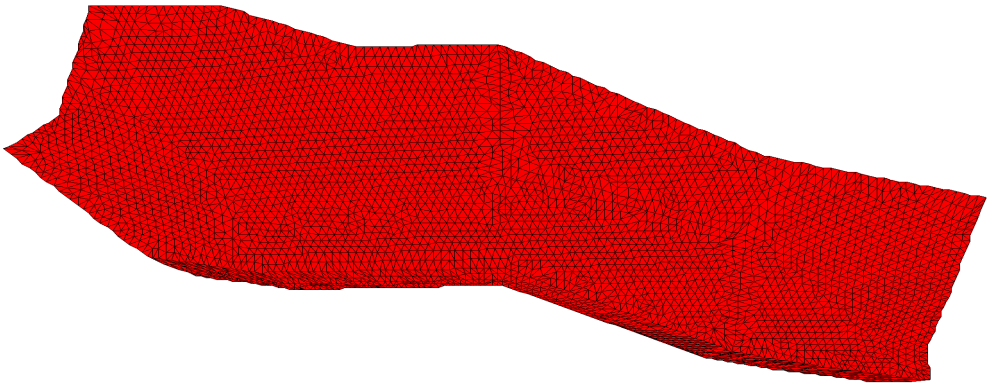


Abb. 9.9: d^{3}f-Gitter zur Ansicht der Modellgeometrie
von oben aus südlicher Richtung (80fach überhöht)

Die hydrogeologischen Parameter wurden aus dem zweidimensionalen, geeichten Modell übernommen und durch gemessene Werte ergänzt (siehe Tabelle 9.2). Der Aquifer wurde in insgesamt vier Untereinheiten eingeteilt, wobei im wesentlichen nur die Permeabilität variierte. Diese ist anisotrop. Sie ist in vertikaler Richtung gegenüber dem Wert in horizontaler Richtung reduziert. Die transversale Dispersion konnte leider nicht nach horizontaler und vertikaler Richtung unterschieden werden. Daher ist die transversale Di-

Tabelle 9.2: Modellparameter zur Simulation des Palla Road Aquifers

Parameter	Symbol	Zone MM1	Zone MM2	Zone TM1	Zone TM2
horizontale Permeabilität	$k_{horizontal}$ [m^2]	$6{,}83 \cdot 10^{-13}$	$3{,}25 \cdot 10^{-12}$	$6{,}83 \cdot 10^{-15}$	$3{,}25 \cdot 10^{-14}$
vertikale Permeabilität	$k_{vertikal}$ [m^2]	$1{,}37 \cdot 10^{-13}$	$6{,}50 \cdot 10^{-13}$	$1{,}37 \cdot 10^{-15}$	$6{,}5 \cdot 10^{-15}$
Porosität	ϕ [-]	0,20	0,20	0,10	0,10
longitudinale Dispersion	α_L [m]	600			
transversale Dispersion	α_T [m]	60			
Diffusions-koeffizient	D_m [$m^2\ s^{-1}$]	$8{,}7 \cdot 10^{-10}$			

spersionslänge von 60 m im Vergleich zur vertikalen Ausdehnung des Aquifers von etwa 80 m relativ groß, was eine starke dispersive Vermischung in der Vertikalen verursachen kann.

Die den Aquifer bildende Sandsteinschicht ist relativ stark nach Süden und etwas nach Osten gekippt (siehe Abbildung 9.10, rechts). Der Salzwassereinstrom erfolgt im südlichen Bereich und daher an einer tiefliegenden Stelle des Aquifers. Für diesen Salzeintrag wurde angenommen, daß er seitlich im unteren Bereich des Aquifers erfolgt, da Bohrlochmessungen darauf hinweisen, daß die Salzkonzentrationen im unteren Aquiferbereich wesentlich größer als im oberen Bereich sind. Die Konzentration des einströmenden Salzwassers wurde entsprechend dieser Messungen zu c_{max} = 1,3% gewählt. Die Dichte ergibt sich dann (für eine reine NaCl-Lösung) zu ρ = 1,0075 g cm^{-3}. Die Zustromrate an Salzwasser ist nicht bekannt und wurde im Modell in der Weise angepaßt, daß die sich in stationären Rechnungen einstellende Salzkonzentrationsverteilung mit der gemessenen Verteilung abgeglichen wurde. Dabei ergab sich auf einer Fläche von $2{,}35 \cdot 10^{+5}$ m^2 ein Wert von $5{,}93 \cdot 10^{+4}$ $m^3\ a^{-1}$. Das sonst einströmende Wasser hat Konzentrationen zwischen c = 0,04% und c = 0,07%. Der relative Dichteunterschied zwischen diesen Werten beträgt etwa 0,0087 g cm^{-3}, was etwa den Verhältnissen von Versuch a des Saltpools entspricht (siehe Unterkapitel 7.2).

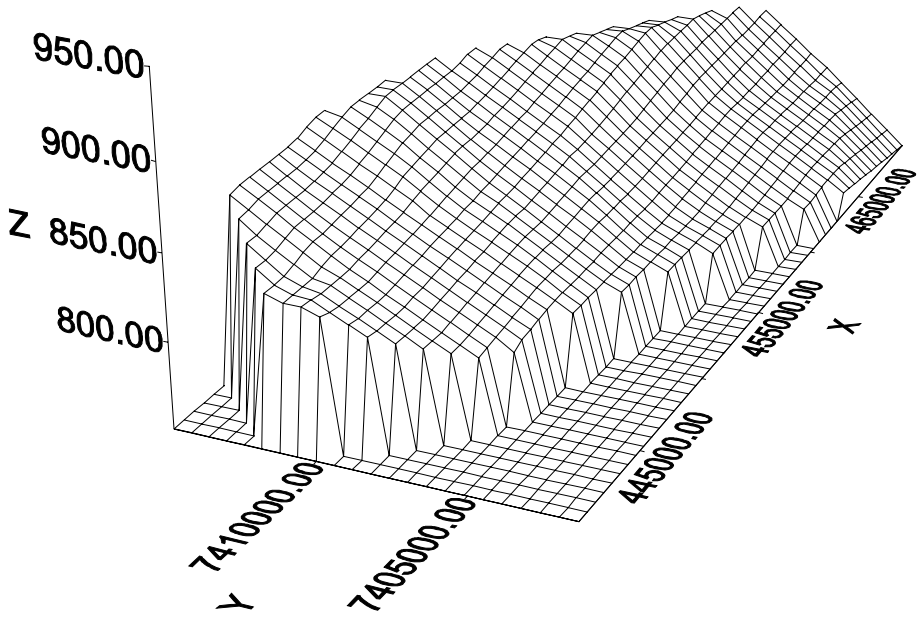


Abb. 9.10: Ansicht der Aquifersohle aus Westen

Ab 1988 erfolgte eine Grundwasserentnahme in dem in West-Ost-Richtung liegenden Brunnenfeld, die den stationären Zustand in einen instationären verwandelt. Im Modell wurde diese Entnahme durch einen Brunnen im östlichen Teil des Brunnenfeldes und einen Brunnen im westlichen Teil berücksichtigt. Die Brunnen sind dabei über die ganze Aquifertiefe verfiltert, weshalb sie im Modell als entsprechende senkrechte Liniensenken realisiert wurden. Es wurde ein Szenario analog zur bestehenden Studie [146] verwendet, das von einem weiteren Anstieg der Entnahme bis zum Jahr 2000 ausgeht, um dann auf dem dortigen Niveau beibehalten zu werden (siehe Abbildung 9.11). Sie beträgt $6{,}5 \cdot 10^{+5}$ m^3 a^{-1} im westlichen Brunnenfeld und $9{,}2 \cdot 10^{+5}$ m^3 a^{-1} im östlichen. Infolge der relativ großen Entnahme sinkt der Ausstrom aus dem Gebiet beträchtlich ab. Aus den Zustromgebieten muß zudem eine größere Wassermenge in den gespannten Aquifer einströmen. Eine Entspeicherung infolge Kompressibilität konnte in d^3f nicht berücksichtigt werden, ebensowenig eine Entspeicherung im Falle von freien Aquiferbereichen.

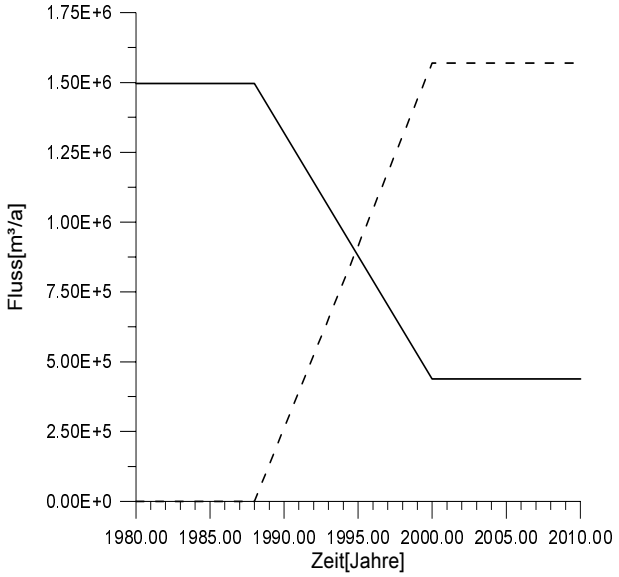


Abb. 9.11: Grundwasserentnahme im Brunnenfeld (gepunktete Linie) und Ausstrom aus dem Modellgebiet (durchgezogene Linie)

9.2.3 Simulation und Ergebnisse

Es wurden sowohl eine Rechnung unter Berücksichtigung der Effekte durch die auftretenden Dichteunterschiede als auch eine Rechnung unter Vernachlässigung dieser Effekte durchgeführt. Daraus läßt sich dann auch ersehen, ob sich die Dichteströmung in dem behandelten Fall auf die Entnahme auswirkt und ob generell ein dichteabhängiges Modell zu verwenden ist. Zunächst wurde jeweils ein stationärer Zustand berechnet. Dazu wurde von einer verschwindenden Konzentration im gesamten Gebiet ausgegangen und die zeitliche Entwicklung unter den vorliegenden Randbedingungen berechnet, bis sich die Salzkonzentrationsverteilung nicht mehr veränderte. Dieses war nach einigen tausend Jahren simulierter Zeit erfüllt. Als Konsequenz aus dem negativen Einfluß der Upwind-Verfahren auf die Approximationsgenaugkeit der Lösung beim Saltpool-Problem (siehe [117]) wurde für den letzten Zeitraum kein Upwind-, sondern ein Galerkin-Verfahren benutzt.

Die stationäre Konzentrationsverteilung ist in Abbildung 9.15 dargestellt, wobei horizontale Schnitte durch das Aquifergebiet verwendet wurden. Die Ausdehnung des Salzwassergebietes erstreckt sich, insbesondere im unteren Bereich, bis zu dem Gebiet im Osten, in dem die Strömung stark von dem von Norden einströmenden Wasser niedriger Konzentration bestimmt wird (siehe Abbildung 9.15, unterstes Bild).

Ausgehend von der stationären Situation wurde anschließend die Zeitentwicklung, beginnend mit der Grundwasserentnahme, simuliert. Innerhalb der ersten Jahre ändert sich die Konzentrationsverteilung kaum, aber über längere Zeiträume betrachtet, macht sich die neue Strömungssituation auch in der Konzentrationsverteilung bemerkbar (siehe Abbildung 9.12). Dieses entspricht den langen Zeiträumen, die zum Erreichen des statio-

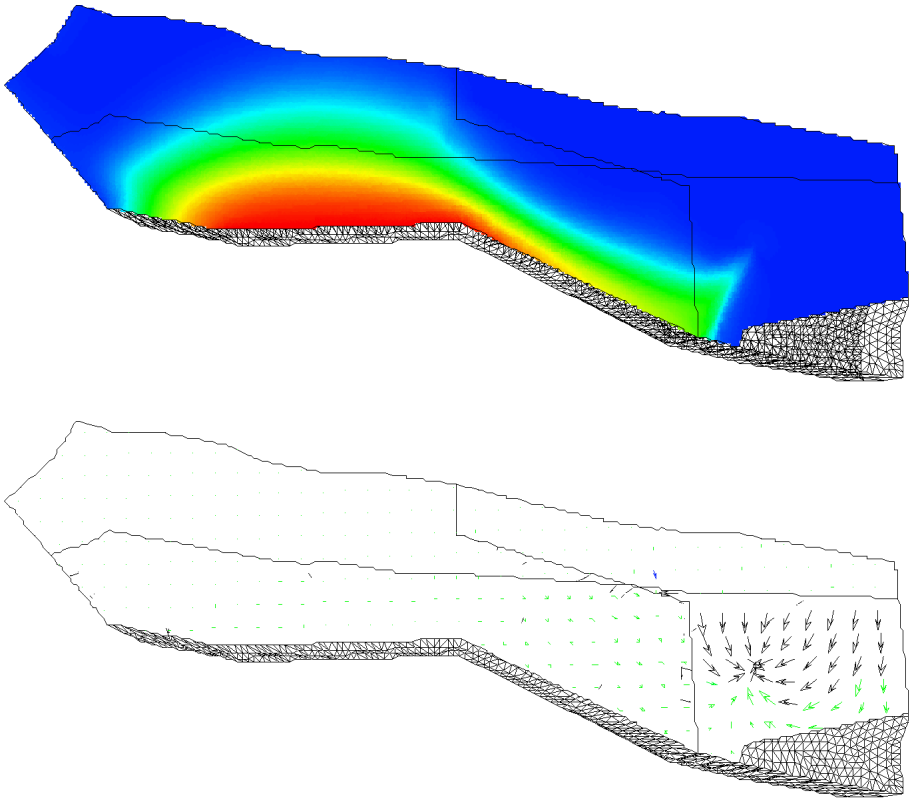


Abb. 9.12: Horizontalschnitt der Konzentrationsverteilung in Höhe 845 m im Jahre 2 100 (oben) und entsprechendes Geschwindigkeitsfeld (unten)

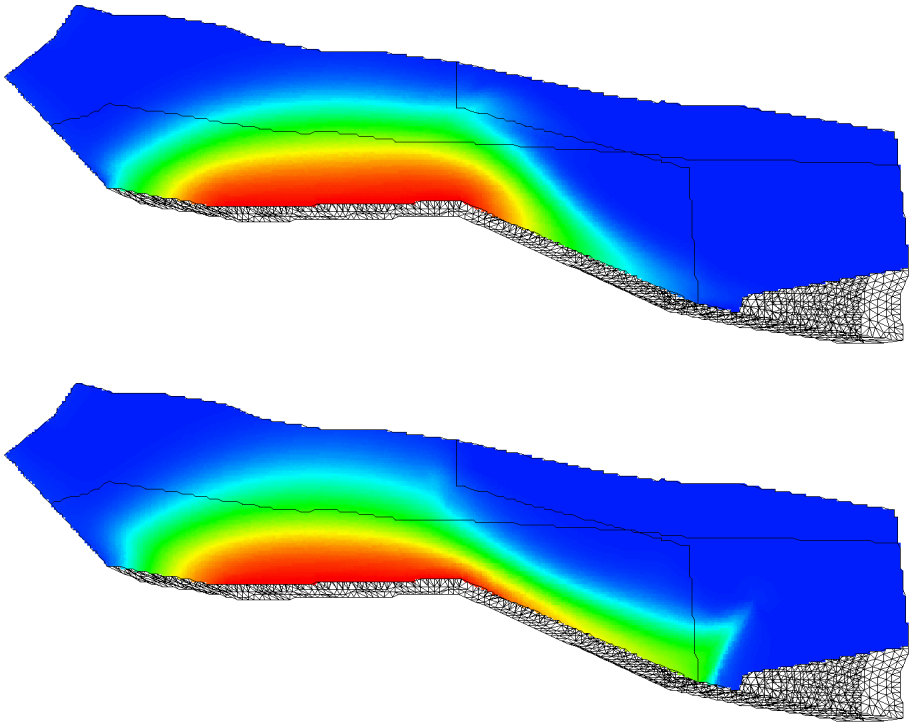


Abb. 9.13: Konzentrationsverteilung ohne Berücksichtigung von Dichteeffekten Horizontalschnitt in 845 m Höhe: Stationäre Verteilung (oben) und im Jahre 2100 (unten)

nären Zustandes nötig waren. Das im Aquifer vorhandene salinare Wasser verschiebt sich teilweise nach Osten zu den Brunnen hin. Dort vermischt es sich zum einen mit dem im Südosten einströmenden Wasser, das dann direkt nach Osten zum Ausstromrand des Aquifers fließt, wird aber zum anderen auch zu den Brunnen hingezogen, was beim östlichen Brunnenfeld (mit dem Hauptteil der Entnahme) gut zu sehen ist.

Wie die Salzkonzentration in den Brunnen ansteigt, ist in Abbildung 9.14 dargestellt. Während im westlichen Brunnenfeld nur ein kurzes und schwaches Ansteigen zu bemerken ist, steigt die Konzentration im östlichen Brunnenfeld stärker an, nimmt nach etwa 100 Jahren einen Maximalwert von c = 0,044% an und fällt dann wieder ab. Für den Betrieb der Brunnen bedeutet dies, daß innerhalb dieses Szenarios die Salzkonzentration in einem moderaten Bereich bleibt und somit die Qualität des entnommenen Wassers

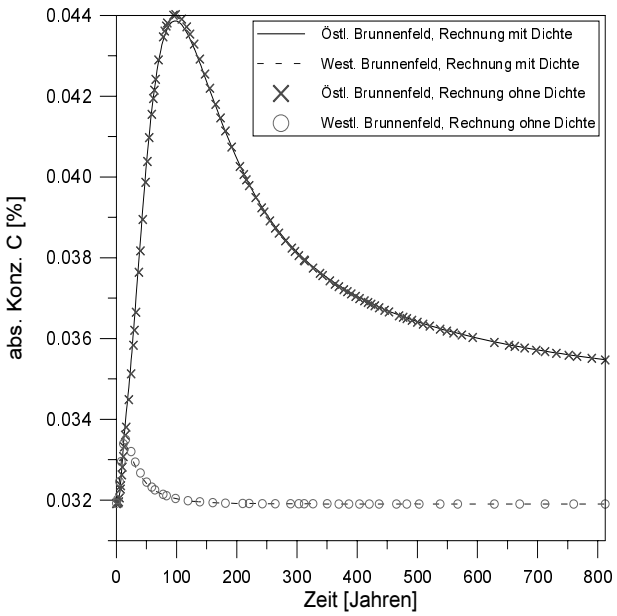


Abb. 9.14: Salzkonzentration in den Entnahmebrunnen in Zeiten nach Beginn der Entnahme

nicht beeinträchtigt wird. Allerdings läßt sich auch daraus schließen, daß generell in solchen Situationen aus einer Beobachtung der Salzkonzentrationen über kurze Zeiträume noch nicht auf das langfristige Verhalten geschlossen werden kann.

Die Rechnungen ohne Dichteeinfluß zeigen ein fast identisches Verhalten im Vergleich zu den Rechnungen mit Berücksichtigung der Dichteunterschiede (siehe Abbildung 9.13): Die stationäre Konzentrationsverteilung und die Verteilung im Jahre 2100 zeigen dasselbe Verhalten. Auch die Konzentrationen in den Brunnen sind kaum zu unterscheiden. Die maximal angenommene Salzkonzentration ist nur wenig größer als diejenige in der Rechnung mit Berücksichtigung von Dichteeffekten (siehe Abbildung 9.14).

In diesem Modell ist der Einfluß von Dichteunterschieden auf die Entwicklung der Konzentrationsverteilung nicht wichtig. Er erzeugt in den Durchbruchskurven lediglich eine Abweichung im Bereich von einigen Prozenten.

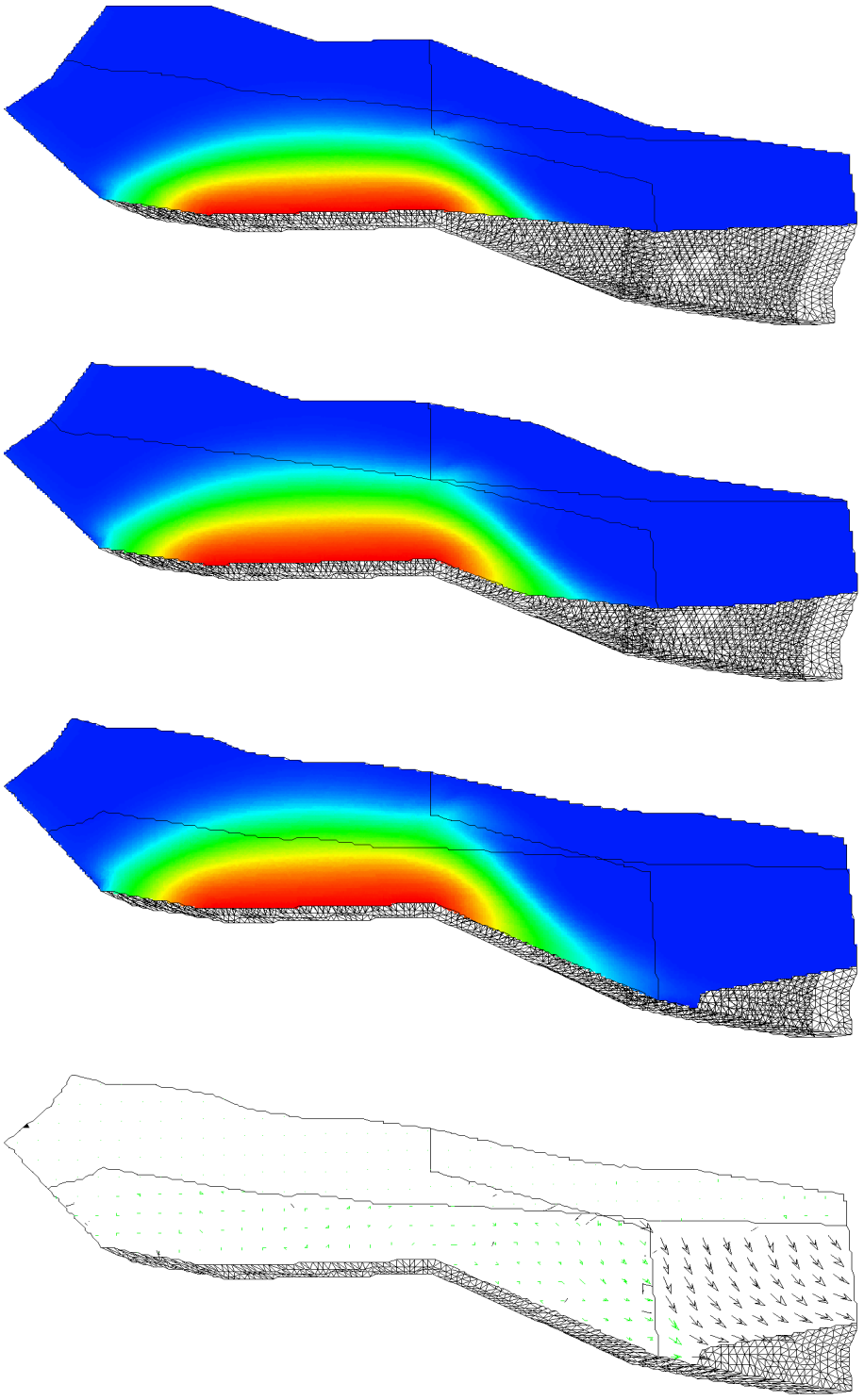


Abb. 9.15: Konzentrationsverteilung der stationären Lösung.
Dargestellt sind Horizontalschnitte mit einer z-Koordinate von 870 m, 860 m und 845 m (von oben nach unten). Das unterste Bild gibt die Geschwindigkeiten in der untersten Schnittebene an.

10 Rechenzeiten

Eines der Ziele bei der Entwicklung von d^{3}f (vergl. Unterkapitel 2.2) war es, die Simulation der Grundwasserbewegung unter Berücksichtigung der Salinität für große dreidimensionale und hydrogeologisch komplexe Gebiete in praktikablen Rechenzeiten zu ermöglichen. Um die Effizienz und Schnelligkeit nachzuweisen, wurden Rechenzeitvergleiche mit einem konventionellen Rechenprogramm durchgeführt. Zusätzlich wurde zum Ende der Projektlaufzeit an einem dreidimensionalen Modell die Leistungsfähigkeit von d^{3}f demonstriert.

10.1 Rechenzeitvergleich zwischen d^{3}f und Saltflow

Anhand von Rechnungen zum zweidimensionalen Henry Problem (siehe Unterkapitel 6.2) wurde im Oktober 1996 ein erster Vergleich der von d^{3}f benötigten Rechenzeit mit derjenigen von einem anderen konventionellen FE-Dichteströmungsprogramm (`Saltflow`) durchgeführt. Die Eigenschaften bzw. die verwendeten Einstellungen der beiden Programme waren dabei:

Tabelle 10.1: Eigenschaften von `Saltflow` und d^{3}f

`Saltflow`	d^{3}f
• Version 2.0 • Galerkin FE • 3D (eine Elementschicht) • expliziter Advektionsterm • strukturiertes Gitter • vordefinierte Zeitschrittweiten • Compiler: f90 (f77), optimiert (O2)	• Version vom 07.10.96 • 2D • ohne Gitteradaption • ohne Zeitschrittsteuerung • Compiler: gcc, optimiert (O2)

Die Rechnungen wurden auf den folgenden zwei Workstations ausgeführt:

- DEC alpha 600 5/333, 256 MB Hauptspeicher, specfp95 13.2

- SGI Indigo^2 R 10000, 256 MB Hauptspeicher, specfp95 13.8

Da die Rechenleistungen nicht ganz identisch sind, wurde in den wenigen Fällen, die auf der SGI-Workstation berechnet wurden, die Rechenzeit mittels Vergleichsrechnungen auf die Rechenzeit der DEC-Workstation korrigiert. Die Anzahl der verwendeten Gitterelemente wurde für beide Programme gleichermaßen gesteigert, bis die Speichergrenze der verwendeten Rechner erreicht war (siehe Tabelle 10.2).

Tabelle 10.2: Parameter der Rechnungen mit zunehmender Gitterverfeinerung

Gitter	Größe	Elementan-zahl	Δt [min]	Peclet-Zahl	Courant-Zahl
Level 0	32 × 16	512	2,000	3,3	1,9
Level 1	64 × 32	2 048	1,000	1,7	1,9
Level 2	128 × 64	8 192	0,500	0,8	1,9
Level 3	256 × 128	32 768	0,250	0,4	1,9
Level 4	512 × 256	131 072	0,125	0,2	1,9

Das Henry Problem wurde ausgehend von einer Konzentrationsanfangsbedingung $c = 0$ im Aquifer und bis zum Erreichen der stationären Lösung berechnet. Da dabei eine zeitliche Entwicklung des Konzentrationsfeldes durchlaufen wird, die sich auf das numerische Verhalten auswirken könnte, wurde die Rechenzeit zu drei verschiedenen Modellzeitpunkten (20 Minuten, 100 Minuten und 200 Minuten) verglichen.

Tabelle 10.3: Anwachsen des Rechenaufwandes mit der Gittergröße

Vergleichszeitpunkt	`Saltflow`	d^3f	d^3f (opt. Δt)
10 min	1,702	1,442	1,258
100 min	1,692	1,442	1,251
200 min	1,715	1,406	1,231
Durchschnitt	1,703	1,430	1,246

Da die Konvergenzkriterien in beiden Programmen sehr unterschiedlich sind, konnten sie nicht identisch gewählt werden. Sie wurden aber so weit wie möglich aufeinander abgestimmt. Die Zeitschrittweiten wurden bei den Rechnungen mit `Saltflow` möglichst groß

gesetzt. Bei den Rechnungen mit d^{3}f wurden die Zeitschrittweiten zunächst gleich zu denen in `Saltflow` gewählt. In einer zweiten Rechnung wurden größere Zeitschritte verwendet, was aufgrund der Löserkonvergenz zulässig war. Die Ergebnisse zur stationären Konzentrationsverteilung entsprachen bei beiden Programmen denjenigen aus Unterkapitel 6.2. Die Ergebnisse des Vergleichs (siehe Abbildung 10.1) zeigten, daß für Gitter mit einigen tausend Knoten d^{3}f deutlich langsamer ist als das konventionelle Programm. Ab Gittergrößen von etwa 5·10^5 Knoten ist d^{3}f schneller als das konventionelle Programm. Bei Ausnutzung der Möglichkeit zu größeren, aber vorgegebenen Zeitschrittweiten ist d^{3}f schon ab etwa 5·10^4 Knoten schneller. Das Anwachsen der Rechenzeit als Potenzfunktionzu den einzelnenModellzeitpunkten zeigt Tabelle 10.3.

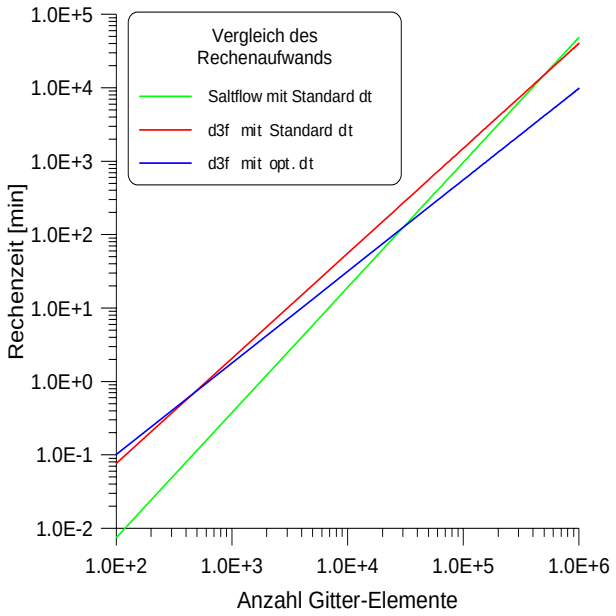


Abb. 10.1: Rechenzeit als Funktion der Anzahl der Gitterelemente

Kurz vor Ende der Projektlaufzeit wurde von der Gruppe von Professor Wittum in Stuttgart ein weiterer Rechenzeitvergleich mit einer aktuelleren Version von d^{3}f durchgeführt, der deutlich kürzere Rechenzeiten von d^{3}f ergab.

10.2 Leistungsfähigkeit von d^{3}f

Zum Ende der Entwicklungszeit wurde eine Testrechnung durchgeführt, um zu demonstrieren, daß d^{3}f in der Lage ist, effizient mit großen Anzahlen von Unbekannten umzugehen. Dazu wurde das zweidimensionale Testbeispiel aus Unterkapitel 8.1 in die dritte Dimension erweitert (siehe Abb. 10.2). Anstelle der stochastischen Permeabiltätsverteilungen wurden im 3D-Fall konstante Mittelwerte benutzt. Dieses Modell, das der Gorlebener Rinne nachempfunden ist, wurde mit ca. 2,8 Millionen Unbekannten (Druck und Konzentration) auf einem massiv parallelen Rechner Cray-T3E mit 256 Prozessoren bis zur Stationarität berechnet. Dazu wurden knapp zehn CPU-Stunden benötigt. Damit wurde der Nachweis erbracht, daß d^{3}f die geforderten Leistungen erbringt. An diesem Beispiel wird außerdem deutlich, daß durch diese Neuentwicklung nicht mehr die Software, sondern die Hardware durch den Kernspeicher die Grenzen für die Größe von Modellen setzt.

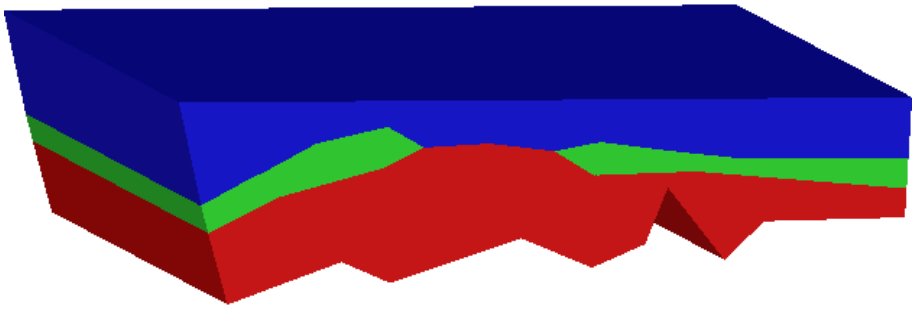


Abb. 10.2: Dreidimensionales Modellgebiet
entstanden durch Expandierung des in Abb. 8.1 dargestellten zweidimensionalen Testgebietes in die dritte Dimension

In der Abb. 10.3 sind die Strömungsgeschwindigkeiten in drei Ebenen des Modellgebietes in Schlierendarstellung zu sehen. Die im oberen Bildteil dargestellte Ebene ist die vertikale Mittelebene des Modellgebietes, während die beiden anderen orthogonal auf dieser stehen. Bemerkenswert an diesen beiden vertikalen Querebenen ist, daß bereits in diesem bezüglich der dritten Dimension sehr homogenen Modellgebiet Rotationswalzen

auftreten. Dieses zeigt im Nachhinein die Richtigkeit der Entscheidung, das Rechenprogramm d^3f für die Modellierung dreidimensionaler Dichteströmungen entwickeln zu lassen.

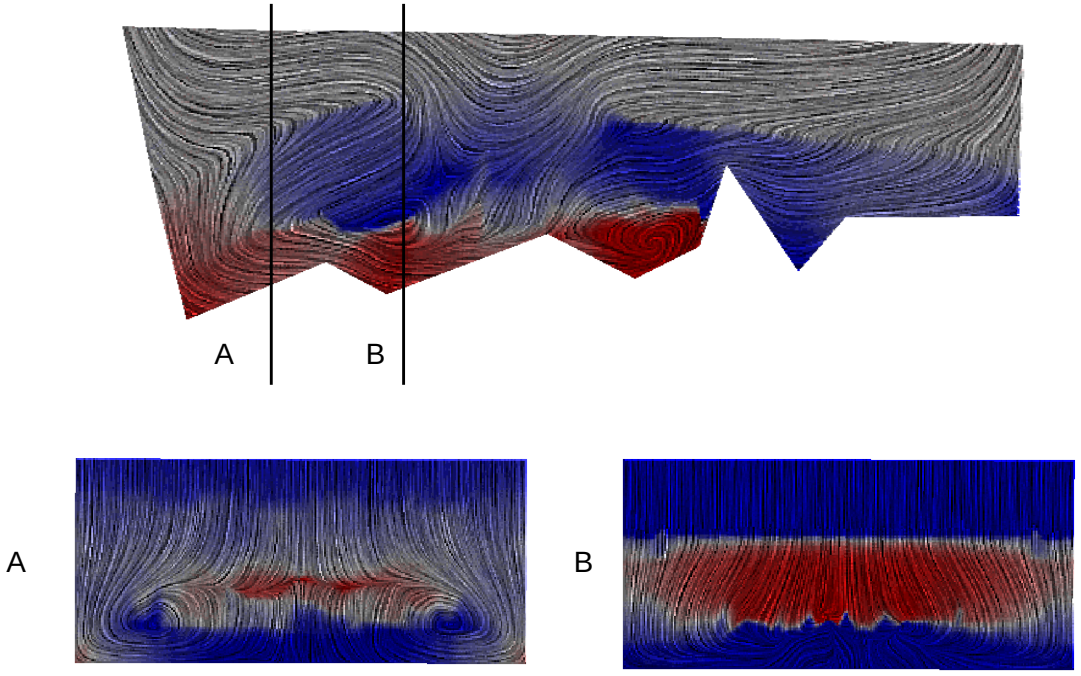


Abb. 10.3: Schlierendarstellung der Geschwindigkeiten
in Längsrichtung (oben) und in Querrichtung (unten).
Die Lage der beiden orthogonalen Schnitte ist oben angezeigt.

11 Zusammenfassung und Ausblick

In den vergangenen Jahren konnte in Modellierungen der Einfluß der Versalzung auf Grundwasserströmungen nicht berücksichtigt werden. Die Gründe hierfür sind einerseits numerische Probleme bei Rechnungen mit vorhandenen Programmen und andererseits beschränkte Rechnerkapazitäten bei großen Modellgebieten mit komplexer geologischer Struktur. Lediglich in zweidimensionalen Modellen konnten Dichteströmungen behandelt werden. So wurden bis zum heutigen Zeitpunkt alle genehmigungsrelevanten Strömungsmodellierungen für Süßwasser durchgeführt, die allenfalls durch zweidimensionale Salzwassermodelle ergänzt wurden.

Da von einer Weiterentwicklung bereits vorhandener Programme generell keine ausreichende Beschleunigung der Rechenleistung, wie sie für große und komplexe Modellgebiete notwendig ist, erwartet werden konnten, sollte ein neues Rechenprogramm entwikkelt werden. Die benötigte Beschleunigung konnte nur unter Nutzung moderner numerischer Verfahren, die die heute gegebenen Hardwaremöglichkeiten voll ausschöpfen, erreicht werden.

11.1 Der Entwicklungsstand von d^3f

Das Projekt wurde von mehreren unabhängigen Arbeitsgruppen an verschiedenen Standorten bearbeitet, die die einzelnen Teile des Programmpakets in Eigenverantwortung entwickelten. Zur erfolgreichen Durchführung des Projektes war eine enge Kooperation zwischen den Arbeitsgruppen notwendig. Die Projektkoordination umfaßte dabei vor allem technische und terminliche Absprachen. Die wichtigsten Ergebnisse der einzelnen Arbeitsgruppen werden im folgenden zusammengefaßt.

Aufbauend auf den Erfahrungen zur Lösung einer skalaren zweidimensionalen Konvektions-Diffusionsgleichung wurde ein robustes Mehrgitterverfahren zur Lösung der Gleichungen der dichtegetriebenen Grundwasserströmung entwickelt. Durch die Benutzung der Software Toolbox UG (Unstrukturierte Gitter) erlaubte die modulare Struktur des Simulators die Kombination einzelner Untermodule zu komplexen Algorithmen.

Es wurden Generatoren zur Erzeugung von Gittern aus Tetraedern, Prismen und Pyramiden bzw. aus Dreiecken entwickelt. Hierdurch wird es möglich, auch komplexe anisotrope Gitter mit relativ geringer Knotenanzahl zu generieren. Die Diskretisierung der beiden nichtlinear gekoppelten Gleichungen wurde mit Hilfe der Methode der finiten Volumen für unstrukturierte Gitter durchgeführt. Dabei wird die lokale Massenerhaltung durch Einbeziehung aller implementierten Randbedingungen und der Quell- und Senkenterme gewährleistet. Zur Steuerung der räumlichen und zeitlichen Adaptivität wurden Fehlerindikatoren entwickelt, auf deren Grundlage ein effizienter Algorithmus zur Steuerung der Gitter- und Zeitschrittweitenlänge aufgebaut wurde.

Dichtegetriebene Grundwasserströmungen werden durch zwei nichtlineare, gekoppelte, zeitabhängige Differentialgleichungen beschrieben. Die zeitabhängigen Gleichungen werden mit einem voll impliziten Zeitintegrationsverfahren gelöst. Dabei wurde neben der entwickelten Zeitschrittweitenkontrolle eine konvergenzabhängige Strategie zur Steuerung der Zeitschrittweiten entwickelt. Die nichtlinearen Gleichungen werden mit Hilfe eines optimierten Newton-Verfahrens voll gekoppelt gelöst. Das dabei entstehende lineare Gleichungssystem wird mit Hilfe des BiCGStab-Verfahrens mit einem linearen Mehrgitterverfahren als Vorkonditionierer gelöst. Zur Lösung der Grobgittermatrizen finden zwei Strategien Anwendung, und zwar ein exakter Löser mit Bandbreitenoptimierung und ein algebraisches Mehrgitterverfahren.

Für den Fall konvektionsdominanter Strömungen wurde das Aligned-Finite-Volumen-Verfahren entwickelt. Hierbei handelt es sich um ein modifiziertes Finite-Volumen-Verfahren, bei dem die Kontrollvolumina der Elemente optimal an der Konvektion ausgerichtet werden. Es wurde für Dreiecks- und Tetraederelemente implementiert.

Die Parallelisierung von d^3f basiert auf einem nachrichtengekoppelten Modell. Für den Nachrichtenaustausch zwischen den Prozessoren wurde die maschinenunabhängige Schnittstelle PPIF (parallel processing interface) implementiert. Diese setzt auf einem SPMD-Programmiermodell (single program over multiple data stream) auf, das sich besonders gut für numerische Anwendungen eignet. Die parallele, dynamische Verwaltung der Datenstruktur wurde den Erfordernissen angepaßt und daraufhin überarbeitet. Für die Datenaufteilung des Mehrgitters auf die verschiedenen Prozessoren wurde ein spezielles elementbasiertes Überlappungskonzept erarbeitet.

Die Aufgabe der Lastmigration übernimmt das Programmiermodell DDD (Dynamic Distributed Data), das die Funktionalität des Verteilens von Datenobjekten zwischen den lokalen Speichern der Parallelrechner bietet. Das DDD minimiert außerdem den Datentransfer zwischen den Prozessoren und die Anzahl der Nachrichtenübertragungen, um eine bestmögliche Effizienz des Gesamtverfahrens zu erhalten. Die Mehrgitterstruktur des d^3f mußte an das Schema der verteilten Graphen, dem das DDD zugrunde liegt, angepaßt werden.

Es wurde eine Verfeinerungsstrategie auf der Basis eines allgemeinen Element-Konzepts für zwei und drei Raumdimensionen realisiert. Die Verwaltung der unstrukturierten, lokal verfeinerten Mehrgitterhierarchie für zwei- und dreidimensionale Gitter wurde überarbeitet. Die Realisierung einer beliebigen Elementverteilung auf die Prozessoren wurde als Vorarbeit zum lokalen, parallelen Verfeinern ermöglicht.

Um eine effiziente Handhabbarkeit des Simulationsprogramms zu gewährleisten, wurden den verschiedenen Aufgabenstellungen angemessene graphische Benutzeroberflächen entwickelt. Von diesen graphischen Oberflächen aus können sowohl serielle als auch parallele Anwendungen sowie das Prä- und Postprocessing gestartet werden.

Für die Eingabe der Modelldaten wurde ein interaktiver, graphischer Präprozessor entwickelt, mit dem alle für eine Simulation benötigten Daten erzeugt bzw. editiert werden können. Schwerpunkt dieser Arbeiten war die Erstellung eines Geometriemodells. dabei wird im zweidimensionalen von digitalisierten Querschnitten und im dreidimensionalen von digitalisierten Tiefenlinienplänen ausgegangen, die mit Hilfe verschiedener Werkzeuge verschnitten werden können. Um eine interaktive Handhabung zu ermöglichen, wurde der Präprozessor innerhalb der graphischen Programmierumgebung GRAPE (GRAphical Programming Environment) erstellt.

Für den Postprozessor wurde ein ebenfalls auf GRAPE aufbauendes hierarchisches Visualisierungskonzept realisiert. Da die Datenmengen, die bei der Modellierung von großen Gebieten zur Visualisierung anfallen können, unter Umständen enorm groß sind, wurde eine adaptive Darstellung auch nicht-adaptiv berechneter Daten erforderlich. Durch diese effiziente Aufbereitung der Datenbasis können selbst sehr große Datensätze in Echtzeit dargestellt werden. Neben den üblichen Möglichkeiten zur Darstellung von

Isolinien und -flächen, Geometrien, Geschwindigkeiten etc. stehen auch Particle-Tracking- Verfahren zur Verfügung. Zusätzlich gibt es die Möglichkeit, Animationen zu erstellen.

11.2 Verifizierung von d^3f

Nach einer Überprüfung der Formulierung der Gleichungen, der Konsistenz von Rand- und Anfangsbedingungen und einer Untersuchung des Dispersionstensors wurden drei Wege zur Verifizierung des neuen Modellcodes d^3f beschritten:

- Zunächst wurden die in der Literatur verwendeten Benchmarks auf ihre Verwendbarkeit untersucht. Dabei wurde festgestellt, daß sie entweder insensitiv sind (Henry Problem), keine exakte - bzw. analytische - Lösung besitzen (Hydrocoin Level 1, Case 5), oder keine eindeutige Lösung besitzen und als Experiment zu ungenau dokumentiert sind (Elder Problem).
- Für ein zweidimensionales stationäres Problem konnte eine exakte Lösung konstruiert werden. Allerdings ist sie wieder durch die Stationarität und die geringere Dimensionalität in ihrer Testmöglichkeit eingeschränkt.
- Da Bedarf nach objektiven Tests, insbesondere nach instationären Testfällen in drei Dimensionen, bestand, wurden sehr sorgfältig kontrollierte Laborversuche durchgeführt. Diese wurden mit d^3f nachgerechnet.

Bei den durchgeführten Verifizierungsrechnungen zeigte sich, daß d^3f in der Lage ist, die gestellten Aufgaben zu lösen. Beim Henry-Problem stimmen der analytische und numerische Lösung sehr gut überein. Die Lösung für das Problem Hydrocoin, Level 1, Case 5 entspricht denjenigen aus der Literatur. Die Vergleichbarkeit hängt jedoch sehr stark von der verwendeten Gitterfeinheit ab. Anhand des Elder Problems wurden Untersuchungen zur Stabilität und Eindeutigkeit der Lösung durchgeführt. Leider sind die publizierten Ergebnisse auf Grund der kurzen Modellzeiten zu einem Vergleich mit d^3f-Ergebnissen nicht geeignet. Hierfür werden Modellzeiten von mehr als 200 Jahren benötigt. Außerdem konnte eine Inkonsistenz, die in der Beschreibung der Randbedingung existierte, untersucht und beseitigt werden.

Der Vergleich einer vorgegebenen exakten Lösung und der dazugehörigen numerischen Lösung ergab, daß der maximale Fehler beim Druck bei 0,05 ‰ und bei der Konzentration unter 1 ‰ liegt. Dieser Test beschränkt sich leider auf zweidimensionale, stationäre Problemstellungen.

Das wichtigste Experiment für die Überprüfung des numerischen Modells ist das Saltpool-Experiment in den beiden Versionen mit geringer und hoher Dichte der Salzschicht. Bei der Simulation mit d^3f treten Abweichungen zu den experimentellen Ergebnissen auf. Gründe für die Abweichungen sind wahrscheinlich die Approximationseigenschaften der verwendeten Elemente und die zeitliche Diskretisierung. Unter Umständen müßte die Knotenzahl noch gesteigert werden. In einigen Fällen treten noch Konvergenzprobleme auf, insbesondere wenn der Dispersionstensor eine im Vergleich zur horizontalen geringere vertikale Querdispersivität enthält. Auch scheint nicht vollständig sichergestellt, daß die Rechnung noch stabil abläuft, wenn bei adaptiver Gitteranpassung eine zu große Anzahl von Knoten erzeugt wird, für die der zur Verfügung stehende Rechenspeicher nicht ausreichend ist. Vergleichsrechnungen mit anderen Rechencodes zeigen, daß keines der Programme in der Lage ist, die Meßdaten in allen Dichtebereichen zu reproduzieren. Dieses gelingt mit d^3f im Bereich hoher Dichten am besten.

Der Testfall “Fingering” bereitet allen Programmen Schwierigkeiten. Mit d^3f kann die Entwicklung von Instabilitäten prinzipiell nachvollzogen werden. Die Rechnung mit d^3f fingert aber zu stark. Aus den Rechnungen wird ersichtlich, daß numerische Effekte wie numerische Dispersion durch große Gitterweiten oder Upwind-Verfahren zu einer Dämpfung der physikalischen Instabilität führen können. Daher ist die Verwendung von Standard-Galerkin-Verfahren empfehlenswert, um eine adäquate Entwicklung von Finger-Instabilitäten zu erlauben. Hier kann allerdings im Falle numerischer Oszillationen eine unerwünscht starke Anfachung der Instabilitäten erfolgen. Die Rechnungen sollten auf jeden Fall mit den physikalisch relevanten Anfangsstörungen durchgeführt werden, anstatt sich nur auf die durch numerische Fehler bedingte Anfachung des Fingering zu verlassen.

11.3 Feldanwendungen

Diese Tests sollten im Grunde nur zeigen, daß realistischere Geometrien behandelt werden können und daß Optionen wie Punkt- und Linienbrunnen sowie die Anisotropie der Permeabilität funktionieren. Dieses war prinzipiell auch möglich, aber es konnten im Fall der Insel Weizhou weder eine hohe Gitterverfeinerung eingestellt noch die adaptive Gittersteuerung eingesetzt werden, da dann keine Konvergenz erreicht wurde. Dieselben Beobachtungen wurden auch bei dem Fall Palla Road gemacht. Auch der Versuch, einen Dispersionstensor im anisotropen Medium zu verwenden, führte zu Konvergenzproblemen. Die Erfahrungen in der Testphase zeigen, daß nicht nur objektiv die Eigenschaften des Programms, sondern auch die Beherrschung des Programms durch den Nutzer getestet werden: Die Problematik der Dichteströmungen ist kompliziert, und es gibt viele Einstell- und Wahlmöglichkeiten für den Nutzer, die über die Konvergenz mitentscheiden. Schon allein die besten Einstellungen zu finden, mit denen eine gute Konvergenz erreicht wird, erfordert manchmal viel Zeit. Eigentlich konnte die Gitterkonvergenz bei den Testfällen nie gesichert erreicht werden. Diese ist heutzutage mit seriellen Rechnern im Grunde nur mit der adaptiven Gitteranpassung von d^3f erreichbar, wenn der Einsatz von kleinen Gitterelementen auf die Bereiche mit großem geschätzten Fehler konzentriert werden kann. Hier zeigt sich die Wichtigkeit der Neuentwicklung d^3f besonders deutlich, da sie als einzige im Prinzip mit dem Rechenergebnis den Nachweis der Genauigkeit zusammen liefern kann. Bis zum fehlerfreien Funktionieren ist noch einiger Aufwand an Tests und Korrekturen im Programm notwendig. Die Investition in diese Arbeiten ist sehr lohnend, da nur so eine neuer Standard in der Qualität numerischer Strömungsberechnungen erreicht werden kann.

11.4 Vorteile von d^3f gegenüber anderen Dichteströmungsprogrammen

Die mit Dichteströmungsprogrammen erzeugten Ergebnisse mögen noch so beeindruckend aussehen, aber wenn es keine objektive Möglichkeit zur Einschätzung ihrer Genauigkeit gibt, sind sie von zweifelhaftem Wert. Zu Beginn der Entwicklung von d^3f stand die Anforderung einer maximalen Anzahl von Knoten (10 Millionen) im Vordergrund, mit denen gerechnet werden sollte. Die praktische Erfahrung zeigt jedoch, daß die Nutzungsstrategie anders sein sollte: Das Programm wird in der Praxis immer zuerst mit relativ

wenig Knoten (10 000 - 100 000) verwendet werden. Dieses kann für viele Aufgabenstellungen, insbesondere bei adaptiver Diskretisierung, bereits völlig ausreichen. In der Regel wird man immer mit geringer Knotenzahl beginnen, um erste Abschätzungen zu machen, die Zeit- und Ortsdiskretisierungsstrategie zu optimieren und gute Einstellungen für die numerischen Steuerparameter zu finden. Das bedeutet aber, daß d^3f bei Verwendung von wenigen Knoten genauso bequem handhabbar sein sollte wie andere kommerzielle Codes. Danach kann dann das neue Programm seine Vorteile bei hohen Knotenzahlen ausspielen, um auch die Gitterkonvergenz nachzuweisen. Diese “Knotenreserve” von 1 bis 10 Millionen Knoten wird in vielen Fällen erforderlich sein, um diesen Nachweis führen zu können. Die Knotenreserven können strategisch günstig eingesetzt werden durch die adaptive Verfeinerung. Außer d^3f kann dieses kein anderes Programm leisten. Allerdings sollte neben der Überprüfung der Gitterkonvergenz der Rechnungen mit einem Modell erst dessen prinzipielle Richtigkeit, etwa durch den Vergleich mit Messungen, gesichert werden. Selbst dieses setzt aber auch schon Rechnungen mit großen Knotenzahlen voraus. An dieser Stelle muß noch erwähnt werden, daß eine stochastische Untergrundstruktur erzeugt und auf das Gitter von d^3f aufgebracht werden kann. 2D-Berechnungen der Salzströmungsphänomene wie Fingering und Walzen zeigten, daß die Heterogenität mit den von homogenen Medien bekannten Phänomenen interagiert. Insbesondere können Walzen durch Heterogenität zerstört werden.

11.5 Wünschenswerte Weiterentwicklungen von d^3f

Die Entwicklung von d^3f kann noch nicht als abgeschlossen angesehen werden. Da d^3f noch ein sehr junges Programm ist, kann nicht verwundern, daß es noch nicht über eine Infrastruktur wie ältere Programme verfügt. Aus dem gleichen Grund muß auch noch immer mit kleineren Fehlern und Unzulänglichkeiten im Programm gerechnet werden, die sich erst bei einer genügend großen Anzahl von Anwendungsfällen zeigen werden.

Da die Handhabbarkeit von d^3f derzeit noch nicht vergleichbar ist mit der von kommerziellen Programmen, muß in der Folgezeit die entsprechende Weiterentwicklung mit Priorität fortgeführt werden. Dazu gehören unter anderem:

- eine Vereinfachung der Problemeingabe,

- die Schaffung bzw. Vervollkommnung von Möglichkeiten, nicht nur graphische Information, sondern auch numerische Ergebnisdaten aus dem Programm zu beziehen für:
  - räumliche und zeitliche Massenbilanzen über beliebige Flächen
  - Durchbruchskurven an beliebigen Punkten

Daneben gibt es eine Vielzahl von Erweiterungen für d^{3}f, die die Anwendungsmöglichkeiten wesentlich erweitern können. Bei der Konzeption und der Zusammenstellung der Anforderungen an eine Neuentwicklung lag das Schwergewicht auf der Anwendung effizienter Algorithmen und moderner Rechnerarchitekturen. Zu deren Gunsten wurden damals verschieden Fähigkeiten, die von einem fortgeschrittenen Programm zur Modellierung von Dichteströmungen erwartet werden können, nicht gefordert. Um d^{3}f einem breiteren Anwendungsbereich zuführen zu können, wären folgende sinnvolle Erweiterungen denkbar:

- die Berücksichtigung der Wasserspeicherung durch Kompressibilität
- freie Grundwasseroberfläche
  Zur Modellierung von Salzwasserintrusionsproblemen in Küstengebieten ist die letzte Option unverzichtbar.
- Erweiterung auf Wärmetransport (Wärmeleitung der Gesteinsmatrix)
- simultaner Wärme- und Salztransport
- Transportprogramm mit Rückhaltemechanismen

11.6 Resümee

Mit der Fertigstellung des Programmpakets d^{3}f ist es nunmehr möglich, Berechnungen von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte für große, dreidimensionale und hydrogeologisch komplexe Modellgebiete durchzuführen. Die Entwicklung eines effizienten, parallelen Lösers ermöglicht es, die dabei entstehenden großen Gleichungssysteme innerhalb praktikabler Rechenzeiten zu lösen. Hierdurch wird es möglich, die den bisherigen Rechnungen für Langzeitsicherheitsanalysen anhaftenden Überkonservativitäten und Unsicherheiten abzubauen. Darüber hinaus ist die Integration moderner, leistungsfähiger numerischer Verfahren in ein komplexes Programmsystem unter Verwendung so-

wohl serieller als auch paralleler Rechnerarchitekturen gelungen. Somit wurden Fortschritte auf den Gebieten Langzeitsicherheitsanalyse, Numerik und Softwareengineering gemacht.

12 Literatur

[1] Andersson, K., Grundfelt, B., Hodgkinson, D.P., Lindbom, B., Jackson, C.P.: Hydrocoin Level 1. Final Report: Verification of groundwater flow models. Technical report, Swed. Nucl. Power Insp. (SKI), Stockholm, 1986

[2] Angermann, L.: An a posteriori estimation for the solution of elliptic boundary value problems by means of upwind FEM. IMA Journal of Numerical Analysis, 12: 201 - 215, 1992.

[3] Angermann, L.: Balanced a posteriori error estimates for finite-volume type discretizations of convection-dominated elliptic problems Computing, 55: 305 - 323, 1995.

[4] Angermann, L.: An upwind scheme of finite volume type with reduced crosswind diffusion. Technical Report 165, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Erlangen, Juli 1995.

[5] Angermann, L.: A posteriori error estimates for approximate solutions of nonlinear equations with weakly stable operators. Preprint 209, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Erlangen-Nürnberg, 1996.

[6] Angermann, L., Knabner, P., Thiele, K.: An error estimator for a finite volume discretization of density driven flow in porous media. IMACS Journal Applied Numerical Mathematics, 26: 179 - 191, 1998.

[7] Babuska, I., Rheinboldt, W.C.: Error estimates for adaptive finite element computations. SIAM Journal on Numerical Analysis, 15(4): 736 - 754, 1978.

[8] Bänsch, E.: Numerical experiments with adaptivity for the porous medium equation. Acta Math. Univ. Comenianae, 64(2): 157 - 172, 1995.

[9] Bastian, P.: Locally Refined Solution of Unsymmetric and Nonlinear Problems. In: Proc. of the Eighth GAMM-Seminar, Kiel, 1992.

[10] Bastian, P.: Parallele Adaptive Multigridverfahren. Teubner Skripten zur Numerik. Teubner-Verlag, 1996.

[11] Bastian, P.: Persönliche Mitteilung an K. Johannsen. 1996.

[12] Bastian, P., Birken, K., Eckstein, K., Johannsen, K., Lang, S., Neuss, N., Rentz-Reichert, H: UG - a flexible software toolbox for solving partial differential equations. Computing and Visualization in Science, 1(1): 27 - 40, 1997.

[13] Bear, J.: On the tensor form of dispersion. J. Geophys. Res., 66, 4, S. 1185ff, 1961.

[14] Bear, J.: Dynamics of Fluids in Porous Media. Elsevier, New York, 1972.

[15] Becker, J.: Abschlußbericht der Arbeitsgruppe Kröner/Rumpf zum Projekt “Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte”. Universität Freiburg, Institut für Angewandte Mathematik, 1998.

[16] Beddies, G., Johannsen, K.: Abschlußbericht der Arbeitsgruppe Wittum zum Projekt “Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte”. Universität Stuttgart, Institut für Computeranwendungen 3, 1998.

[17] Bey, J.: Tetrahedral grid refinement. SFB 382, Universität Tübingen, Report Nr. 18, Juni 1995.

[18] Bieterman, M., Babuska, I.: The finite element method for parabolic equations I. A-posteriori error estimation. Numerische Mathematik, 40: 339 - 371, 1982.

[19] Bieterman, M., Babuska, I.: The finite element methode for parabolic equations II. A-posteriori error estimation and adaptive approach. Numerische Mathematik, 40: 373 - 406, 1982.

[20] Birken, K.: Ein Modell zur effizienten Parallelisierung von Algorithmen auf komplexen, dynamischen Datenstrukturen. PhD Thesis, Universität Stuttgart, in Vorbereitung, 1998.

[21] Birken, K., Bastian, P.: Dynamic Distributed Data (DDD) in a parallel programming environment - specification and functionality. Forschungs- und Entwicklungsbericht RUS-22, Rechenzentrum der Universität Stuttgart, Germany, September 1994.

[22] Borisov, S., Yakirevich, A., Sorek, S.: , Henry's problem - improved numerical results. Nicht veröffentlicht; persönliche Korrespondenz mit Alexander Yakirewich, Water Resources Research Center, J. Blaustein Institute for Desert Research, Ben-Gurion University of the Negev, Israel, 1996.

[23] Blacker, T.D., Stephenson, M.B.: Paving: A new approach to automated quadriliteral mesh generation. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 32: 811 - 847, 1991.

[24] Blacker, T.D., Meyers, R.J.:. Seams and wedges in plastering: A 3-d hexahedral mesh generation algorithm. Engineering with Computers, 9: 83 - 93, 1993.

[25] Brakhagen, F., Schüller, A.: Zur Bedeutung von Parallelrechnerarchitekturen und effizienten Algorithmen bei der numerischen Simulation von Transportvorgängen in porösen Medien. Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung mbH, GSF-Seminar am 4. Juni 1991 in Braunschweig.

[26] Braess, D.: Finite Elemente. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1992.

[27] Brewitz, W., Busch, W.: Key Issues of the German R&D Programme on Long-Term Safety Aspects for Radioactive Waste Repositories in Salt Formations. Proceedings of the Third International Conference On Nuclear Fuel Reprocessing and Waste Management, RECOD '91, Held in Sendai, Japan, April 14 - 18 1991.

[28] Brezina, M., Vanek, P., Mandel, J.: Algebraic multigrid on unstructured meshes. Technical Report, ftp-server “tiger.denver.colorado.edu”.

[29] Burnett, R.D., Frind, E.O.: Simulation of Contaminant Transport in Three Dimensions. 2. Dimensionality Effects. Water Resources Research, 23,4: 695 ff, 1987.

[30] Cabrol, B., Leedom, L.: Imaging Vector Field Using Line Integral Convolution, Computer Graphics Proceedings, Annual Conference Series, 1993.

[31] Callaghan, P.T.: Principles of Nuclear Magnetic Resonance Microscopy. Clarendon Press, Oxford, 1991.

[32] Carrington, A., A.D. McLachlan, A.D.: Introduction to Magnetic Resonance. Chapman and Hall, London, 1979.

[33] Barret, R., Berry, M., Chan, T., Demmel, J., Donato, J., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C, van der Horst, H.: Templates for the solution of linear systems: Building blocks for iterative methods. 2nd edition, SIAM, Philadelphia, PA, 1994

[34] Deuflhard, P., Bornemann, F.: Numerische Mathematik II. Walter de Gruyter & Co, Berlin, 1994.

[35] Diersch, J.G.: Interactive, Graphics-based Finite-Element Simulation System FEFLOW for Modeling Groundwater Flow, Contaminant Mass and Heat Transport Processes. FEFLOW User’s manual Version 4.5, Berlin, 1996.

[36] d^3f - A Simulator for Density-Driven Flow. User’s Manual. Compiled by E. Fein, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (mbH), Braunschweig, 1999.

[37] d^3f - A Simulator for Density-Driven Flow. Test Case Library. Compiled by E. Fein, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (mbH), Braunschweig, 1999.

[38] Elder, J.W.: Steady free convection in a porous medium heated from below. Journal of Fluid Mechanics, 27, 1, S. 29ff, 1966.

[39] Elder, J.W.: Transient Convection in a Porous Medium. J. Fluid. Mech. 27, 609ff, 1967.

[40] Eriksson, K., Johnson, C.: Adaptive finite element methods for parabolic problems I: A linear model problem. SIAM Journal on Numerical Analysis, 28(1):43 - 77, 1991.

[41] Eriksson, K., Johnson, C.: Adaptive finite element methods for parabolic problems II: Optimal error estimates in $L_\infty L_2$ and $L_\infty L_\infty$. SIAM Journal on Numerical Analysis, 32(3): 706 - 740, 1995.

[42] Eriksson, K., Johnson, C.: Adaptive finite element methods for parabolic problems IV: Nonlinear problems. SIAM Journal on Numerical Analysis, 32(6): 1729 - 1749, 1995.

[43] Eriksson, K., Johnson, C.: Adaptive finite element methods for parabolic problems V: Long time integration. SIAM Journal on Numerical Analysis, 32(6), 1995.

[44] Fein, E.: Intraval Test Case 13: Brine Transport in Porous Media at High Salinity. GSF-Bericht 5/91, GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, 1991.

[45] Fein, E.: Statusreport: Grundwasserprogramme mit variabler Dichte. GSF-Bericht 31/91. GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, 1991.

[46] Fein, E.: Strategie zur Entwicklung eines schnellen Grundwasserprogramms mit variabler Dichte. Abteilungsbericht IfT 9/92. GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, 1992.

[47] Fein, E.: Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierungvon Grundwasserströmungen mit Variabler Dichte. Fachliches Feinkonzept. Abteilungsbericht IfT 3/93. GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit GmbH, 1993.

[48] Fein, E.: Präprozessor: Anforderungskatalog. Internes Papier, 1997.

[49] Fletcher, R.: Proc. Dundee Biennal Conf. on Numerical Analysis. Chapter: Conjugate gradient methods for indefinite system: 33-53. Springer, New York. 1975.

[50] Fogwell, T.: Endlagersicherheit: Grundwasserprogramme mit variabler Dichte. International Technology Corporation, Martinez, California 94553, 1992.

[51] rolkovič, P.: Finite volume discretizations of density driven flows in porous media. In: Vilsmeier R., Benkhaldoun F., editors: Finite Volumes for Complex Applications: 433 - 440. Hermes, Paris, 1996.

[52] rolkovič, P., Schwarz, C.: Some remarks on d^3f's boundary conditions. Interne Notizen, Erlangen, Zürich, 1998.

[53] rolkovič, P., Knabner, P., Tapp, C., Thiele, K.: Adaptive finite volume discretization of density driven flows in porous media. Preprint 220, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Erlangen-Nürnberg, FR Germany, 1997. Lecture Notes to INRIA Rocquencourt: Transport de contaminants multiespeces en milieux poreux, Jun 2 - 6, 1997.

[54] rolkovič, P.: Maximum principle and local mass balance for numerical solutions of transport equation coupled with variable density flow. Acta Mathematica Universitatis Comenianae, 67(1), 1998.

[55] rolkovič, P., Knabner, P., Tapp, C., Thiele, K.: Abschlußbericht der Arbeitsgruppe Knabner zum Projekt “Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte”. Universität Erlangen-Nürnberg, Institut für Angewandte Mathematik, 1998.

[56] George, P.L.: Automatic mesh generation. Wiley, 1993.

[57] George, P.L., Seveno, E.: The advancing-front mesh generation method revisited. International journal for numerical methods in engineering, 37: 3605 - 3619,1994.

[58] Goldstein, H.: Klassische Mechanik. Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt a.M., 3. Auflage, 1974.

[59] GRAPE manual. SFB 256, University of Bonn: http://www.iam.uni-bonn.de/main.html, Bonn, 1995.

[60] GRAPE, **GRA**phics **P**rogramming **E**nvironment : Reference Manual. SFB 256, Bonn, 1994.

[61] Greiner, A., Schreiber, W., Brix, G., Kinzelbach, W.: Magnetic Resonance Imaging of Paramagnetic Tracers in Porous Media: Quantification of flow and transport parameters. Water Resources Research, 33(6), S. 1461ff, 1997.

[62] Guillot, G., Kassab, G., Hulin, J.P., Rigord, P.: Monitoring of tracer dispersion in porous media by NMR imaging. J. Phys. D, Appl. Phys., 24, S. 763ff, 1991.

[63] Hackbusch, W.: Multi-Grid Methods and Applications. Springer-Verlag, 1985.

[64] Hackbusch, W.: On first and second order box schemes. Computing, 41:277 - 296, 1989.

[65] Hackbusch, W.: Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme. Teubner-Studienbücher: Mathematik, 1991.

[66] Häfner, F., Boy, S., Behr, A., Wagner, S.: Entwicklung von Verfahren und Programmen zur Kalibrierung von Strömungs- und Transportmodellen. Endbericht des BMBF-Vorhabens mit dem Förderkennzeichen 02 C 0244 8. Institut für Bohrtechnik und Fluidbergbau der TU Bergakademie Freiberg, 1998.

[67] Happe, R.-T., Polthier, K., Rumpf, M., Wierse, M.: Visualizing Data from Time-Dependent Adaptive Simulations, Proceedings ”Visualisierung ’95”, Bremen, 1995.

[68] Hassanizadeh, S.M.: Derivation of basic equations of mass transport in porous media. Part 1. Macroscopic balance laws. Advances in Water Resources, 9, 12, S. 196ff, 1986.

[69] Hassanizadeh, S.M.: Derivation of basic equations of mass transport in porous media. Part 2. Generalized Darcy’s and Fick’s laws. Advances in Water Resources, 9, 12 S. 207ff, 1986.

[70] Hassanizadeh, S.M.: Experimental Study of Coupled Flow and Mass Transport: A Model Validation Exercise. Proceedings der ModelCARE 90 in Den Haag, IAHS Publikation Nr. 195, 1990.

[71] Hassanizadeh, S.M, Leijnse, A.: A non-linear theory of high-concentration-gradient dispersion in porous media. Advances in Water Resources, 18, 4, S. 203ff, 1995.

[72] Henry, H.R.: Salt Intrusion into Coastal Aquifers. Doktorarbeit, Columbia University, 1960.

[73] Henry, H.: Effects of dispersion on saltwater encroachment in coastal aquifers, Sea water in coastal aquifers. Geological Survey Water-Supply, Paper 1613-C, pages C70 - C84, 1964.

[74] Herbert, A.W., Jackson, C.P., Lever, D.A.: Coupled Groundwater Flow and Solute Transport With Fluid Density Strongly Dependent Upon Concentration. Water Resources Research, 24 (10), S. 1781ff, 1988.

[75] Holzbecher, E.: Modeling Density-Driven Flow in Porous Media. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1998.

[76] Hwang, K. : Advanced Computer Architecture. McGraw-Hill, 1993.

[77] Ikeda, T.: Maximum principle in finite element models for convection-diffusion phenomena. North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford, 1983.

[78] Jensen, K.H., Bitsch, K., Bjerg, P.L.: Large-Scale Dispersion Experiments in a Sandy Aquifer in Denmark: Observed Tracer Movements and Numerical Analyses. Water Resources Research, 29, 3, S. 673 ff, 1993.

[79] Johannsen, K.: Aligned 3d-finite-volumes for convection-diffusion-problems. In Vilsmeier R., Benkhaldoun F., editor. Finite Volumes for Complex Applications: 291–300. Hermes, Paris, 1996.

[80] Johannsen, K.: An aligned 3D-Finite-Volume Method for Convection-Diffusion Problems. Notes on Num. Fluid Mech., 59: 227 - 243, 1997.

[81] Johannsen, K., Lang, S., Neuss, N., Rentz-Reichert, H., Bastian, P., Birken, K., Wieners, C.: UG - a flexible software toolbox for solving partial differential equations. Computing and Visiualization in Science, 1: 27 - 40, 1997.

[82] Jüttner, U.: Der Konverter dxf2msh. Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1997.

[83] Jussel, P., Stauffer, F., Dracos, T.: Transportmodeling in heterogeneous aquifers: 1. Statistical description and numerical generation of gravel deposits. Water Resources Research, 30, 6: 1803ff, 1994.

[84] Kasper, H., Rother, T.: Geometrische Beschreibung der hydrogeologischen Situation. Internes Papier. 1996.

[85] Kasper, H., Taniguchi, T., Kosakowski, G.: Dreidimensionale Hydrogeologische Modelle zur Finite Elemente Analyse geogener Strömungs- und Transportprozesse. In: GIS in Forschung und Praxis, Hrsg. Dr. G. Buziek, Konrad Wittwer Verlag, 1995.

[86] Kinzelbach, W., Oswald, S., Schwarz, C.: Abschlußbericht der Arbeitsgruppe Kinzelbach zum Projekt “Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte”. ETH Zürich, Institut für Hydromechanik und Wasserwirtschaft, 1998.

[87] Klinge, H., Vogel, P., Schelkes, K.: Chemical Composition and Origin of Saline Formation Waters from the Konrad Mine, Germany. In: Proc. of the 7th International Symposium on Water-Rock Interaction: 1117 - 1120, Balkema. Rotterdam, 1992

[88] Knabner, P., rolkovič, P.: Consistent velocity approximations in finite element and volume discretizations of density driven flow in porous media. In Aldama A. A. et al., editor, Computational Methods in Water Resources XI: 93 - 100. Computational Mechanics Publications, Southampton, Boston, 1996.

[89] Knabner, P., Tapp, C., Thiele, K.: Adaptive finite volume discretization of density driven flows in porous media. Acta Mathematica Universitatis Comenianae, 67(1), 1998.

[90] Konikow, L.F., Sanford, W.E., Campbell, P.J.: Constant-concentration boundary condition: Lessons from the HYDROCOIN variable-density groundwater benchmark problem. Water Resources Research, 33 (10): 2253 - 2261, 1997.

[91] Kolditz, O.: Strömung, Stoff- und Wärmetransport im Kluftgestein. Gebr. Borntraeger. Berlin - Stuttgart, 1997.

[92] Kröhn, K.-P.: Zur Modellierung der Grundwasserströmung mit variabler Dichte - Sensitivitätsstudien auf der Grundlage eines Laborexperiments von Elder. Technischer Bericht, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, 1994.

[93] Lake, L.W., Carrol, H.B. Jr., Wesson, T.C. (Editoren): Reservoir Characterization II. Proceedings of the Second International Reservoir Characterization Conference, held in Dallas, Texas, June 1989, San Diego, 1991.

[94] Lanczos, C.: Solution of systems of linear equations by minimized iteration. J. Res. Nat. Bur. Standards, 49: 33 - 53, 1952.

[95] Lang, S.: Adaptive refinement and coarsening of unstructured grid hierarchies. Technical report, Institut für Computeranwendungen der Universität Stuttgart, 1997 (in preparation).

[96] LaVenue, A.M., Cauffman, T.L., Pickens, J.F.: Ground-Water Flow Modeling of the Culebra Dolomite, Volume I: Model Calibration. Contractor Report SAND89-7068/2, Sandia National Laboratories, Albuquerque, 1990.

Cauffman, T.L., LaVenue, A.M., McCord, J.P.: Ground-Water Flow Modeling of the Culebra Dolomite, Volume II: Data Base. Contractor Report SAND89-7068/1, Sandia National Laboratories, Albuquerque, 1990.

[97] Leijnse, A.: Free convection for high concentration solute transport in porous media. In: Contaminant Transport in Groundwater, ed. Kobus & Kinzelbach, Balkema, Rotterdam, 1989.

[98] Leijnse, A., Glasbergen, P., Nijhoff-Pan, I., Sauter, F.J.: Calculation of Groundwater Flow and Particle Tracking for the Gorleben Site with METROPOL. RIVM Report 728516001, Bilthoven, 1989.

[99] Leijnse, A.: Three-dimensional modeling of coupled flow and transport in porous media. PhD thesis, University of Notre Dame, Indiana, 1992.

[100] Leijnse, A.: Comparison of solution methods for coupled flow and transport in porous media. In: Computational methods in surface and subsurface hydrology, ed. Russell, Brebia, Gray and Pinder, 1992.

[101] Lever, D.A., Jackson, C.P.: On the Equations for the Flow of Concentrated Salt Solution through a Porous Medium. Harwell Laboratory, Oxfordshire, report AERE-R 11765, 1985.

[102] Li, G.M.: Saltwater intrusion in island aquifers: Development and application of a threedimensional finite element model. Doktorarbeit (in Chinesisch), China University of Geosciences, Wuhan, 1994.

[103] Löhner, R.: Surface gridding from discrete data. In: 4th Annual International Meshing Roundtable, Albuquerque, New Mexico, 1995.

[104] McCormick, S.F.: Multigrid Methods. SIAM Philadelphia, Pennsylvania, 1987.

[105] Metscher, M., Rumpf, M., Wierse, M.: Integrating Vector Fields on Arbitrary Adaptive Meshes, (in preparation), 1998.

[106] Molson, J.W., Frind, E.O.: Saltflow, Version 2.0, Density-dependent flow and mass transport model in three dimensions, User Guide, Waterloo Centre for Groundwater Research, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Kanada, 1994.

[107] Neubauer, R., Ohlberger, M., Rumpf, M., Schwörer, R.: Efficient Visualization of Large-Scale Data on Hierarchical Meshes. W. Lefer, M. Grave (eds.): Visualization in Scientific Computing ’97, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1997.

[108] Neubauer, R., Ohlberger, M., Metscher, M., Rumpf, M., Schwörer, R.: Multiresolutional Visualization on a Procedural Interface on Nested Grids. to appear, 1998

[109] Neuss, N.: Homogenisierung und Mehrgitter. PhD thesis, Universität Heidelberg, 1996.

[110] Niendorf, H.P., Haustein, J.: Grundlagen der MRT und MRS - Kontrastmittel. In: M. Reisser and W. Semmler (Herausgeber), Magnetresonanztomographie. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, S. 83ff, 1992.

[111] Ohlberger, M., Rumpf, M.: Hierarchical and Adaptive Visualization on Nested Grids. Mathematische Fakultät Freiburg, Preprint 22, 1996.

[112] Oldenbourg, C., Pruess, K.: Dispersive transport dynamics in a strongly coupled groundwater-brine flow system. Water Resources Research, 31(2): 289 - 302, 1995.

[113] Oostrom, M., Hayworth, J.S., Dane, J.H., Güven, O.: Behavior of Dense Aqueous Phase Leachate Plumes in Homogenous Porous Media. Water Resources Research 28, 8, S. 2123ff, 1992.

[114] Oostrom, M., J.H. Dane, J.H.: Experimental Investigation of Dense Solute Plumes in an unconfined Aquifer Model. Water Resources Research 28, 9: 2315ff, 1992.

[115] Oswald, S., Schwarz, C., Kinzelbach, W.: Benchmarking in numerical modelling of density driven flow. Proc. of 14th Salt Water Intrusion Meeting SWIM 96, Report Nr. 87, Geological Survey of Sweden, Uppsala, Schweden: 32ff, 1996.

[116] Oswald, S., Kinzelbach, W., Greiner, A., Brix, G.: Observation of flow and transport processes in artificial porous media via magnetic resonance imaging in three dimensions. Geoderma, 80, 3 - 4: 417ff, 1997.

[117] Oswald, S.: Dichteströmungen in porösen Medien: Experimente und Modellierung. Dissertation, ETH Zürich, Nr. 12812, 1998.

[118] Oltean, C., Ackerer, Ph., Buès, M.: Solute Transport in 3D Laboratory Model through an homogeneous porous medium: Behaviour of Dense Phase and Simulation. Computational Methods in Water Resources X, S. 521ff, Kluwer academic publishers, Dordrecht, Niederlanden, 1994.

[119] Patankar, S.V.: Numerical heat transfer and fluid flow. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

[120] Pearl, Z., Magaritz, M., Bendel, P.: Measuring Diffusion Coefficients of Solutes in Porous Media by NMR Imaging. Journal of Magnetic Resonance, 95, S. 597ff, 1991.

[121] Pearl, Z., Magaritz, M., Bendel, P.: Nuclear Magnetic Resonance Imaging of Miscible Fingering in Porous Media . Transport in Porous Media, 12: 107ff, 1993.

[122] Peraire, J., Vahdati, M., Morgan, K., Zienkiewicz, O.C.: Adaptive remeshing for compressible flow computations. Journal of Computational Physics, 72: 449-466, 1987.

[123] Peraire, J., Peiro, J., Morgan, K.: Adaptive remeshing for three-dimensional compressible flow computations. Journal of Computational Physics, 103: 269-285, 1992.

[124] Polthier, K., Rumpf, M.: A Concept for Timedependent Processes, Scientific Visualization, M. Goebel, H. Mueller, B. Urban (eds.), Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1995.

[125] Price, M.A., Armstrong, C.G., Sabin, M.A.: Hexahedral mesh generation by medial surface subdivision: Part I. solids with convex edges. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 38: 3335 - 3359, 1995.

[126] Putti, M., Paniconi, C.: Picard and Newton linearization for the coupled model of saltwater intrusion in aquifers. Advances in Water Resources, 18(3): 159 - 170, 1995.

[127] Quateroni, A., Valli, A.: Numerical approximation of partial differential equations. Berlin, 1994.

[128] Reichert, H., Wittum, G.: Solving the Navier-Stokes-Equations on Unstructured Grids. Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg, Preprint 92 - 13, Heidelberg, 1992.

[129] Robin, M.J.L., Gutjahr, A.L., Sudicky, E.A., Wilson, J.L.: Cross-Correlated Random Field Generation With the Direct Fourier Transform Method. Water Resources Research, 29, 7, pp. 2383, 1993.

[130] Rother, T.: Geometrische Analyse geomorphologischer Stützpunktfelder zur Finite Element Analyse von Strömungs- und Transportprozessen. Diplomarbeit, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1996.

[131] Rother, T.: Abschlußbericht der Arbeitsgruppe Zielke zum Projekt “Entwicklung eines schnellen Programms zur Modellierung von Grundwasserströmungen mit variabler Dichte”. Universität Hannover, Institut für Strömungsmechanik und Elektronische Rechnen im Bauwesen, 1998.

[132] Rumpf, M., Schmidt, A.: GRAPE, **GRA**phics **P**rogramming **E**nvironment. Report 8, SFB 256, Bonn, 1990.

[133] Rumpf, M., Wierse, A.: GRAPE, Eine objektorientierte Visualisierungs– und Numerikplattform. Informatik Forschung und Entwicklung 7, 145 - 151, 1992.

[134] Rumpf, M., Schmidt, A., Siebert, K. G.: Functions defining arbitrary meshes, a flexible interface between numerical data and visualization routines, Report 14, SFB 256, Bonn, 1994.

[135] Schelkes, K., Knoop, R.M., Beushausen, N., Geißler, N. (1990): ”INTRAVAL II; Test Case: Saline Groundwater Movement in an Erosional Channel Crossing a Salt Dome (Part 1)”. Bericht Nr. 13.106/90, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. Hannover, 1990.

[136] Schelkes, K., Vogel, P., Klinge, H., Knoop, R.-M.: Modelling of Variable Density Groundwater Flow with Respect to Planned Radioactive Waste Disposal in West Germany - Validation Activities and First Results -. In: Proc. of NEA/SKI Symp. Validation of Geosphere Flow and Transport Models (GEOVAL), Stockholm, 14.-17.5.1990. Paris/France: OECD: 328 - 335, 1990.

[137] Schelkes, K.: Grundwassermodelle mit variabler Wasserdichte - Validierung von Laborexperimenten und Modellrechnungen zur Tiefenwasserbewegung in Norddeutschland - Abschlußbericht des BMFT-Vorhabens mit dem Förderkennzeichen KWA 58020. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, 1991.

[138] Schincariol, R.A., Schwartz, F.W., An Experimental Investigation of Variable Density Flow and Mixing in Homogeneous and Heterogenous Media. Water Resources Research 26, 10, S. 2317ff, 1990.

[139] Schmelzer, I.: Anisotropic grid generation with intersection-based geometry interface. Technical report, Institute for Mathematic and its Application (IMA), 1993.

[140] Schneiders, R., Bünten, R.: Automatic generation of hexahedral finite element meshes. Computer Aided Geometric Design, 12: 693 - 707, 1995.

[141] Schöberl, J.: An automatic mesh generator using geometric rules on two and three space dimensions. Technical report 95-3, Department of Mathematics. Johannes Kepler University, A-4040 Linz, Austria, 1995.

[142] Schöberl, J.: NETGEN - An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. Computing and Visualization in Science, 1: 41 - 52, 1997.

[143] Schwarz, C.: Dichteabhängige Strömungen in homogenen und heterogenen porösen Medien. Dissertation, ETH Zürich, (in Vorbereitung), 1998.

[144] Segol, G.: Classic Groundwater Simulations. PTR Prentice Hall, New Jersey, 1994.

[145] Sicherheitskriterien für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in einem Bergwerk Bundesanzeiger 35(2), 1983.

[146] Siegfried, T., Kinzelbach, W.: Modelling of groundwater withdrawal and its consequences to the aquifer: A case study in semi-arid Botswana, Projektbericht des Instituts für Hydromechanik und Wasserwirtschaft, ETH Zürich, 1997.

[147] Sloan, S.W.: A fast algorithm for constructing Delaunay triangulations in the plane, Adv. Eng. Software, Vol. 9 n 1, pp. 34 - 55, 1987.

[148] Sonnevelt, P.: CGS, a Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems. SIAM J. Sci. Comp., 10: 36 - 52, 1989.

[149] Stalling, D., Hege C.: Fast and Resolution Independent Line Integral Convolution, Proceedings SIGGRAPH '95, 1995.

[150] Stiefel, E., Hestenes, M.R.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems. J. Res. Nat. Bur. Standards, 49: 409 - 436, 1952.

[151] Storck, R.: Methodik des Sicherheitsnachweises von Endlagern vor dem Hintergrund bestehender Unsicherheiten. KTG Tagung , Fachgruppe Chemie und Entsorgung, Braunschweig, 1991.

[152] Stüben, K., Ruge, J.W.: Algebraic Multigrid. in: McCormick, S.F.: Multigrid Methods. SIAM Philadelphia, Pennsylvania, 1987.

[153] Summ, G.: On the Invertibility of the isoparametric map for pyramidal and prismatic elements. Technical report, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Erlangen-Nürnberg, 1998. (in preparation)

[154] Taniguchi, T.: Interactive automatic mesh generation for transient area, Comp. Methods in Flow Analysis, Vol. 1, 1988.

[155] Taniguchi, T. and Ohta, C.: Application of Delaunay-triangulation to arbitrary 2D domain with straight boundaries, Proc. of Japan Society of Civil Engng., 432 (in Japanisch), 1991.

[156] The International Hydrocoin Project
Groundwater Hydrology Modelling Strategies for Performance Assessments of Nuclear Waste Disposal
Level 1: Code Verification. NEA SKI 1988,
Level 2: Model Validation. NEA SKI 1990,
Level 3: Uncertainty and Sensivity of Groundwater Flow Models. NEA SKI 1991
Summary Report. NEA SKI 1992.

[157] The International Intraval Project
To study validation of geosphere transport models for performance assessment of nuclear waste disposal
Phase 1, Case 13, Experimental study of brine transport in porous media. NEA SKI 1992,
Phase 2, Summary Report. NEA SKI 1997.

[158] Thiele, K.: An error estimation for density driven flow problems in porous media. PhD thesis, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Erlangen-Nürnberg, 1998. (in preperation)

[159] Visvalingam, M., Whyatt, J.D.: The Douglas-Peucker Algorithm for Line Simplification: Re-evaluation through Visualization. Computer Graphics Forum 9,213-228, 1990.

[160] Vogel, P.: Zur Theorie binärer Fluidgemische in porösen Medien. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. Hannover, 1995.

[161] Vogel, P., Schelkes, K., Klinge, H., Geissler, N.: Analysis of Density-Dependent Deep Groundwater Movement in Nothern Germany Influenced by High Salinity. In: Volume of Poster Papers of Conf. Calibration and Reliability in Groundwater Modelling (ModelCare 90), Den Haag/Niederlande, 3. - 6.9.1990.

[162] Vogel, P., Schelkes, K.: Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte für einen Aquifer über einem Salzstock - Dokumentation erster Ergebnisse. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1991.

[163] Vogel, P., Schelkes, K.: Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte für ein Modellgebiet in Norddeutschland - Ergebnisse zur thermisch bedingten Konvektion an einer Salzstockflanke. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1992.

[164] Vogel, P., Schelkes, K.: Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit variabler Dichte für einen Aquifer über einem Salzstock-Dokumentation der Ergebnisse einiger Parametervariationen zur hydrodynamischen Dispersion. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover 1992.

[165] van der Vorst, H.: BiCGSTAB, a fast and smoothly converging variant of BiCG for the solution of nonsymmetric linear systems. SIAM J. Sci. Stat. Comp., 13: 631 - 644, 1992.

[166] Voss, C.I., Souza, W.R.: Variable Density Flow and Solute Transport Simulation of Regional Aquifers Containing a Narrow Freshwater-Saltwater Transition Zone. Water Resources Research, 23, 10: 1857ff, 1987.

[167] Welty, C., Gelhar, L.W.: Stochastic Analysis of the Effects of Fluid Density and Viscosity Variability on Macrodispersion in Heterogeneous Porous Media. Water Resources Research, 27, 8: 2061ff, 1991.

[168] Weast, R.C., (Ed.): Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press Inc., Boca Raton, Florida, 1980.

[169] Weatherhill, N.P.: The integrity of geometrical boundaries in the two-dimensional Delaunay triangulation, Comm. Appl. Num. Methods, Vol. 6: 101 - 109, 1990.

[170] Wesseling, P.: Introduction to multigrid. Wiley, New York, 1992.

[171] Wei, Y.: Stabilized finite element methods for miscible displacement in porous media. M^2AN - Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 28(5):611 - 665, 1994.

[172] Wittum, G.: On the Robustness of ILU-Smoothing. SFB 123, Universität Heidelberg, Preprint Nr. 451, Heidelberg, 1988.

[173] Wittum, G.: Effiziente Löser für Strömungsprobleme. IWR, Universität Heidelberg, BMFT-Workshop “Grundwasserprogramme”, Freudenstadt, 3. - 4. November 1992.

[174] Wooding, R.A., Tyler, S.W., White, I.: Convection in groundwater below an evaporating salt lake: 1. Onset of instability. Water Resources Research, 33, 6: 1199ff, 1997.

[175] Younes, A., Ackerer, Ph.: Etude sur modèle tridimensionnel du devenir des saumures à forte concentration au droit et à l’aval des terrils MDPA. Rapport de fin de contrat, Institut de Mécanique des Fluides, Université Louis Pasteur Strasbourg, Frankreich, 1996 .

13 Notation

Generell wird folgende Schreibweise benutzt:

- Variable p, c
- Vektoren $\boldsymbol{g}$, $\boldsymbol{n}$
- Tensoren D, T_0
- Dateinamen, Computerbefehle `/homefb/d3f`
- Buttons von graphischen Oberflächen Exit

Die einzelnen Größen werden durchgängig folgendermaßen abgekürzt:

Symbol	Bezeichnung	Einheit
p	Druck	Pa
c	Konzentration, Massenbruch	-
ρ	Dichte	kg m^{-3}
ϕ	effektive Porosität	-
t	Zeit	s
$\boldsymbol{g}$	Gravitationsvektor	m s^{-2}
k	Permeabilitätstensor	m^2
μ	dynamische Viskosität	kg m^{-1} s^{-1}
s	Quellen und Senken für Fluidmasse (Gesamtmasse)	kg m^{-3}s
s_c	Quellen und Senken für Salzmasse	kg m^{-3}s
D	Dispersionstensor	m^2 s^{-1}
D_m	molekulare Diffusionskonstante	m^2 s^{-1}
D_{m0}	freie Diffusivität	m^2 s^{-1}
T_o	Tortuositätstensor	-
θ	Temperatur	°C

Für die Angabe aller Größen werden das MKS-System und die daraus abgeleiteten Benennungen verwendet. Temperaturen werden in °C und Winkel in ° angegeben. Im folgenden werden noch die für mathematische Beschreibungen benötigten Symbole definiert.

Symbol	Erklärung	Einheit
$\boldsymbol{n}$	nach außen gerichteter Normalenvektor	-
$\mathbf{I}$	symmetrischer Einheitstensor	-
R^{n}, R_{n}	n-dimensionaler Vektorraum über den reelen Zahlen	

Von besondere Bedeutung ist die Angabe der Konzentration. Sie wird als relativer Massenbruch des Salzes angegeben:

$$c_{rel} = \frac{c_{abs}}{c_{abs,\,max}}$$

Hierbei ist c_{abs} der absolute Massenbruch

$$c_{abs} = \frac{m_{Salz}}{m_{Salz} + m_{H_2O}},$$

während $c_{abs,max}$ den Maximalwert des Massenbruchs in dem speziellen Problem darstellt. Dabei ist darauf zu achten, daß die Konzentration immer bezüglich dieses Maximalwertes angegeben wird. Der Maximalwert der Dichte entspricht dabei immer dieser Maximalkonzentration bei der Referenztemperatur. Dabei wird die Temperaturabhängigkeit der Löslichkeitsgrenze vernachlässigt. Im folgenden wird anstelle von c_{rel} nur noch c benutzt.

14 Veranstaltungen

In der Projektlaufzeit wurden folgende Veranstaltungen durchgeführt:

Tabelle 14.1: Projektveranstaltungen

Veranstaltung	Datum	Ort	Veranstalter
1. Statusgespräch	22./23. März 95	Braunschweig	GSF
Minisymposium : “Modelling Density Driven Flow in Porous Media”	30. März 95	Heidelberg	AG Kinzelbach
Spezialsession über Dichteströmung im GAMM-Seminar: “Modelling and Computation in Environmental Sciences”	12./13. Oktober 95	Stuttgart	ICA Stuttgart Prof. Wittum
2. Statusgespräch	16./17. Oktober 95	Heidelberg	AG Kinzelbach
3. Statusgespräch	25./26. März 96	Stuttgart	AG Wittum
4. Statusgespräch	14./15/ Oktober 96	Erlangen	AG Knabner
5. Statusgespräch	20./21. März 97	Freiburg	AG Kröner
6. Statusgespräch	1./2. Oktober 97	Hannover	AG Zielke
7. Statusgespräch	30./31. März 98	Zürich	AG Kinzelbach
Abschlußgespräch	25. Juni 98	Stuttgart	GRS

15 Veröffentlichungen

15.1 Paper

Kasper, H., Taniguchi, T., Kosakowski, G.: Dreidimensionale Hydrogeologische Modelle zur Finite-Elemente-Analyse geogener Strömungs- und Transportprozesse. Beitrag in “GIS in Forschung und Praxis”. Konrad-Wittwer Verlag 1995

Kolditz, O., Kasper, H., Kosakowski, G.: Hydrogeologische Systemanalyse: Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen. Zbl. Geol. Paläont. teil 1 (1995) H. 9 863 - 880, Stuttgart, April 1997

Oswald, S., Schwarz, C., Kinzelbach, W.: Benchmarking in Numerical Modelling of Density Driven Flow. SWIM 16. - 21. Juni 1996, Malmö, Schweden

Oswald, S., Schwarz, C., Kinzelbach, W.: Benchmarking for Density Driven Flow. IFARE Workshop, 16. - 17. Juni 1996, Strasbourg, Frankreich

Schwarz, C., Oswald, S., Kinzelbach, W.: Some mathematical problems in the context of density flow modelling. IFARE Workshop, 16. - 17. Juni 1996, Strasbourg, Frankreich

rolkovič, P.: Consistent Velocity Approximations in Finite Element or Volume Discretizations of Density Driven Flow. Workshop “Porous Media”, Oberwolfach, 25.2. - 2.3.1996

Thiele, K., Angermann, L., Knabner, P.: An error estimator for a finite volume discretization of density driven flow in porous media. Proc. of ICMS: Grid Adaption in computational PDEs: Theory and Applications. Edinburgh, 1. - 5. Juli 1996, to appear in Applied Numerical Mathematics

Knabner, P., rolkovič, P.: Consistent velocity approximation for finite volume or element discretizations of density driven flow in porous media. Proc. of 11th International Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR 96) 22.6. - 26.6. 1996, Cancun, Mexico

rolkovič, P.: Finite volume discretizations of density driven flows in porous media. Proc. of 1st International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications. 15 - 18. Juli 1996, Rouen, Frankreich, in: Finite Volumes for Complex Applications, Hermes, Paris, 1996

Johannsen, K.: Aligned 3D-finite-volumes for convection-diffusion-problems. Proc. of 1st International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications. 15 - 18. Juli 1996, Rouen, Frankreich, in: Finite Volumes for Complex Applications, Hermes, Paris, 1996

Johannsen, K.: An Aligned 3D-Finite-Volume Method for Convection-Diffusion Problems. Notes on Numerical Fluid Mechanics, Volume 59: Modeling and Computation in Envi-reonmental Sciences. eds. R. Helmig, W. Jäger, W. Kinzelbach, P. Knabner, g. Wittum, Vieweg, 1997

Knabner, P., rolkovič, P., Tapp, C., Thiele, K.: Adaptive Finite Volume Discretization of Density Driven Flows in Porous Media. Lecture Notes INRIA Transport de contaminants multiespeces en milieux poreux. 2. - 5. Juni 1997, Rocquencourt, Frankreich

Rother, T., Kasper, H., Kolditz, O., Taniguchi, T.: Geometric Modelling of Complicated Structures. GAMM 97, Kiel

15.2 Poster

Oswald, S., Kinzelbach, W., Ackerer, Ph., Kuvaev, A.: Density driven flow: a comparison of benchmarks computed with different transport codes. 1. GAMM-Seminar am ICA in Stuttgart, 12. - 13. Oktober 1995

rolkovič, P., Knabner, P., Thiele, K., Tapp, C.: Development of software package for the simulation of density driven subsurface flows. 1. GAMM-Seminar am ICA in Stuttgart, 12. - 13. Oktober 1995

rolkovič, P., Knabner, P., Tapp, C., Thiele, K.: Numerical Study of Density driven Flows in Porous Media. Gordon Research Conference “Modeling of Flow in Permeable Media”, 4. - 9.8.1996, Andover, USA

Oswald, S, Schwarz, C., Kinzelbach, W.: Visualization of flow and transport processes in artificial porous media. NMR in Soil Sciences, 16. September 1996, Wageningen, The Netherlands

Knabner, P., rolkovič, P., Tapp, C., Thiele, K.: Density driven flow through porous media. Workshop “Fachkompetenz im Technisch-Wissenschaftlichen Höchstleistungsrechnen”, Uni Erlangen-Nürnberg, 23.5.1997

Schneider, A., Fein, E.: Recent Developments in the Modelling of Groundwater Flow at High Salinity. SEDE Workshop ”Use of Hydrogeochemical Information in Testing Groundwater Flow Models”, 1. - 3. September 1997, Borgholm, Schweden

Schneider, A., Fein, E.: The Modelling of Groundwater Flow at High Salinity in Large and Hydrogeologically Complex Regions. DisTec ‘98, 9. - 11. September 1998, Hamburg

15.3 Dissertationen

Im Rahmen dieses Projektes wurden folgende Dissertationen zumindest teilweise gefördert:

Birken, Klaus: Ein Modell zur effizienten Parallelisierung von Algorithmen auf komplexen, dynamischen Datenstrukturen. Dissertation, Universität Stuttgart, 1997.

Johannsen, Klaus: Robuste Mehrgitterverfahren für die Konvektions-Diffusions-Gleichung mit wirbelbehafteter Konvektion. Dissertation, Universität Heidelberg, 1998.

Lang, Stefan: Eine parallele Softwareplattform für unstrukturierte Mehrgitterberechnungen. Dissertation, Universität Heidelberg, (in Vorbereitung), 1999.

Oswald, Sascha: Dichteströmungen in porösen Medien: Experimente und Modellierung. Dissertation, ETH Zürich, Nr. 12812, 1998.

Schwarz, Carsten: Dichteabhängige Strömungen in homogenen und heterogenen porösen Medien. Dissertation, ETH Zürich, (in Vorbereitung) 1999.

Thiele, Kathrin: Adaptive Finite Volume Discretization of Density Driven Flows in Porous Media. Dissertation, Uni Nürnberg-Erlangen, (in Vorbereitung) 1999.

Tapp, Christoph: Anisotrope Gitter - Generierung und Verfeinerung. Dissertation, Uni Nürnberg-Erlangen, (in Vorbereitung) 1999.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 5.1 Vertikalschnitt und Tiefenlinienplan 42
Abb. 5.2 Der Douglas-Peucker Algorithmus 44
Abb. 5.3 Hierarchische Datenstruktur der Quadtree-Repräsentation 45
Abb. 5.4 Triangulierter Ausschnitt 46
Abb. 5.5 Vertikal expandiertes 3D-Modell 47
Abb. 5.6 Das Verschneiden von Flächen 49
Abb. 5.7 Beispiele für 3D-Modelle 50
Abb. 5.8 Baryzentrische, Zirkumzentrische und Aligned Finite Volumen 58
Abb. 5.9 Analytische Lösungen für eine 1D-Gleichung 61
Abb. 5.10 Gitter und numerische Lösung für “no upwind” 66
Abb. 5.11 Vergleich verschiedener Upwind-Methoden 67
Abb. 5.12 Geschwindigkeitsapproximationen 71
Abb. 5.13 Modellgebiet mit verschiedenen hydrogeologischen Einheiten 105
Abb. 5.14 Modell: Grenzen der hydrogeologischen Einheiten, Grobgitter 106
Abb. 5.15 Eine oder mehrere Isoflächen zur Konzentrationsdarstellung 106
Abb. 5.16 Isolinien auf einer Schnittebene: Grid-Mode und Patch-Mode 106
Abb. 5.17 Geschwindigkeitsdarstellung: Vektor- und Schlierendarstellung 107
Abb. 5.18 Darstellungsmöglichkeiten für Particle Tracking 107
Abb. 5.19 Darstellung mit der Methode “Probe” 108
Abb. 6.1 Problemdefinition nach [38] von Hydrocoin, Level 1, Case 5 110
Abb. 6.2 Adaptiv angepaßtes Gitter nach 150 Jahren 110
Abb. 6.3 Konzentrations- und Geschwindigkeitsfeld 111
Abb. 6.4 Definition des Henry Problems 112
Abb. 6.5 Vergleich der d^3f Ergebnisse mit Rechnungen anderer Programme 113
Abb. 6.6 Definition des Elder-Problems 116
Abb. 6.7 Anfangsgeschwindigkeit mit inkonsistenten Randbedingungen 117
Abb. 6.8 Anfangsgeschwindigkeit ohne Volumenfluß über den Rand 119
Abb. 6.9 Zeitentwicklung der Konzentrationsverteilung ohne Volumenfluß 120
Abb. 6.10 Anfangsgeschwindigkeit für das gestörte Problem 121
Abb. 6.11 Geschwindigkeitsfeld mit zwei Salzfingern 122
Abb. 6.12 Die Salzverteilung mit zwei Salzfingern 122
Abb. 6.13 Geschwindigkeitsfeld mit einem Salzfinger 123

Abb. 6.14 Die Salzverteilung mit einem Salzfinger 123
Abb. 6.15 Analytisch vorgegebene Druckverteilung 125
Abb. 6.16 Analytisch berechnete Verteilung der Gesamtmassenzugabe 128
Abb. 6.17 Analytisch berechnete Verteilung der Salzmassenzugabe 128
Abb. 6.18 Mit d^3f berechnete Druckverteilung 129
Abb. 6.19 Mit d^3f berechnete Salzverteilung 129
Abb. 6.20 Abweichung zwischen berechnetem und vorgegebenem Druck 130
Abb. 6.21 Abweichung zwischen berechneter und vorgegebener Konzentration 130
Abb. 7.1 Kalibrierung auf c = 1 Gew.-% 137
Abb. 7.2 Versuchsaufbau des Saltpool Problems 138
Abb. 7.3 Gemessene Signalstärke bei Versuch a mit c = 1 % 141
Abb. 7.4 Durchbruchskurve am Auslaß für Versuch a mit c = 1 % 141
Abb. 7.5 Gemessene Signalstärke bei Versuch b mit c = 10 % 143
Abb. 7.6 Durchbruchskurven am Auslaß für Versuch b mit c = 10 % 143
Abb. 7.7 Markierte Fluidvolumina für Versuch b 145
Abb. 7.8 Vergleich zwischen berechneter und gemessener Konzentration 148
Abb. 7.9 Berechnete Konzentrationsverteilung zu Versuch a 149
Abb. 7.10 Berechnete Konzentrationsverteilung zu Versuch b 150
Abb. 7.11 Vertikalschnitt der Konzentrationsverteilung 152
Abb. 7.12 Simulation der Fingerentstehung nach 8,5 min 154
Abb. 7.13 Vergleich der der berechneten Konzentrationsisolinie c = 0,5 156
Abb. 7.14 Durchbruchskurven am Auslaß für Versuch a 157
Abb. 7.15 Durchbruchskurven am Auslaß für Versuch b 158
Abb. 7.16 Fingerwachstumsgeschwindigkeit bei Saltflow 159
Abb. 8.1 Gebiet und Randbedingung für das Layered-Saltdome-Problem 164
Abb. 8.2 Natürlicher Logarithmus der Permeabilitätsverteilung 165
Abb. 8.3 Lösung des Layered-Saltdome-Problems 166
Abb. 8.4 Gebiet und Randbedingungen für das Coast-Problem 167
Abb. 8.5 Salzverteilung auf einem Schnitt nach 1 bzw. 2,5 Jahren 168
Abb. 8.6 Logarithmus der Permeabilitätsverteilung 169
Abb. 8.7 Konzentrationsverteilung nach 1/2, 1 und 3 Jahren 170
Abb. 8.8 Logarithmische Darstellung der Permeabilitätsverteilung 171
Abb. 8.9 Konzentrationsverteilungen mit stochastischer Permeabilität 172
Abb. 8.10 Geschwindigkeitsfeld nach 5,18 Jahren 173

Abb. 8.11 Korrelation zwischen Permeabilität und Konzentration 174
Abb. 9.1 Vertikalschnitt durch Gebietsgeologie nach [102] 176
Abb. 9.2 Schichtenfolge im Modellgebiet Weizhou 177
Abb. 9.3 Beschreibung verschiedener Schichten durch Tiefenlinienpläne 178
Abb. 9.4 Unterteilung der obersten Schicht in Untergebiete 179
Abb. 9.5 Stationäre Konzentrationsverteilung im Vertikalschnitt 180
Abb. 9.6 Konzentration 20 Jahre nach Beginn der Grundwasserentnahme 181
Abb. 9.7 Durchbruchskurven in den Entnahmebrunnen 182
Abb. 9.8 Lage des Modellgebiets für das 3D-Modell 184
Abb. 9.9 d^3f-Gitter zur Ansicht der Modellgeometrie 185
Abb. 9.10 Ansicht der Aquifersohle aus Westen 187
Abb. 9.11 Grundwasserentnahme im Brunnenfeld 188
Abb. 9.12 Horizontalschnitt der Konzentrationsverteilung 189
Abb. 9.13 Konzentrationsverteilung ohne Berücksichtigung von Dichteeffekten 190
Abb. 9.14 Salzkonzentration in den Entnahmebrunnen 191
Abb. 9.15 Konzentrationsverteilung der stationären Lösung. 192
Abb. 10.1 Rechenzeit als Funktion der Anzahl der Gitterelemente 195
Abb. 10.2 Dreidimensionales Modellgebiet 196
Abb. 10.3 Schlierendarstellung der Geschwindigkeiten 197

Tabellenverzeichnis

Tab. 6.1 Parameter des Benchmark-Problems 127
Tab. 7.1 Modellparameter zur Simulation der Experimente a und b 146
Tab. 9.1 Parameter zur Modellierung von Weizhou 177
Tab. 9.2 Modellparameter zur Simulation des Palla Road Aquifers 186
Tab. 10.1 Eigenschaften von Saltflow und d^3f 193
Tab. 10.2 Parameter der Rechnungen mit zunehmender Gitterverfeinerung 194
Tab. 10.3 Anwachsen des Rechenaufwandes mit der Gittergröße 194
Tab. 14.1 Projektveranstaltungen 231

Stichwortverzeichnis

A

Advancing Front 54

algebraisches Mehrgitter 86

Aligned Finite Volumen 88

Anfangsbedingungen 26, 78

Ausstrom 31

Autokorrelation 38

B

Benchmarking 124

BiCGStab-Verfahren 85

BuildTopology 46

C

Clipping 46

D

Darcy-Gesetz 19, 68

Datenausdünnung 43

Dichte 33, 35, 229

Diffusion 38, 229

Diffusivität 229

Diskretisierung 58

Dispersion 19, 87

Dispersionstensor 22

Douglas & Peucker Algorithmus 43

Dreiecke 54

Druck 17

dxf2msh 42

dxf-Format 41

E

Eingabedatei

- boundary 50
- geometry 43, 50
- hydrogeology 50
- initial 50
- source 50

Einstrom 31

Elder Problem

- Eindeutigkeit 121
- Stabilität 119

Entwickler 15

Erhaltungsgleichung

- Gesamtmasse 17
- Salzmasse 17

F

Fehlerschätzer 74, 77

Fingering 148

Finite-Elemente-Methode 59

G

Gauß-Seidel-Verfahren 84

Geschwindigkeit 62, 69

Gittergenerator 52

- IBG 55
- NETGEN 55

Glätter 86

GRAPE 104

Gravitation 38, 229

H

Heterogenität 37, 163

Hexaeder 52

hydrogeologische Einheit 47

I

Ingestionsdosis 7

Insel Weizhou 175

K

Kernspintomographie (NMR) 134

Kompressibilität 20

Konzentration 60, 229

Masse pro Volumen 18
Massenbruch 18
L
Layered-Saltdome 164
Linearisierung
Newton- 60
Picard- 60
Liniensuchverfahren 83
Löser
effiziente 80
Grobgitter- 86
linearer 84
nichtlinearer 83
Lösungsalgorithmen 80
M
Magnetic Resonance Imaging (MRI) 134
Materialeigenschaften 32
Meerwasserintrusion 166, 175
Mehrgitterverfahren 84
Min/Max-Prinzip 62, 65
Modell
dreidimensionales 47
hydrogeologisches 40
zweidimensionales 46
Modellierung
stochastische 95
Multi-Block-Verfahren 53
N
Newton-Verfahren 83
Notation 229
O
Oberbeck-Boussinesq-Approximation 17
Oberfläche
graphische 50
integrierte 102
Oberflächentriangulierung 55
P
Palla Road Aquifer (Botswana) 183
Parallelisierung 89
Konzept 91
Lastmigration 93
Lastverteilung 92
Transparenz 94
Verfeinerung 94
Paving 52
Peclet-Zahl 60
Permeabilität 19, 37, 95, 229
physikalische Testfälle 133
Plastering 52
Porosität 18, 38, 229
Postprozessor 104
Präprozessor 40
Prismen 57
Pyramide 57
Q
Quadtree 47
Quellen 99
R
Randbedingungen 28, 29
Raster-Algorithmus 53
Rechenzeitvergleich 193
S
Saltflow 193
Saltpool 137
Salzfinger 170
Salzstock 31
Salzwasserintrusion 183
Schadstoffe

chemotoxische 1
radioaktive 1
Scheidegger-Ansatz 19
Senken 99
Simulator 51
Streichlinie 144
Subdomain 48
Symmetrieachse 31
T
Tetraeder 55
Tiefenlinienplan 41, 44
Tortuosität 229
Triangulierung 44
U
UG 81
Upconing 137
Upwind 66
exponential 61
full 61
hybrid 61
partial 61
V
Veranstaltungen 231
Verifizierung 102
Coast 3D 103
Elder 2D 102
Elder Problem 114
Henry 2D 102
Henry Problem 111
Hydrocoin 1.5 ..... 103, 109
Komplex 2D 103
Layered-Saltdome 3D 103
Saltdome 2D 103
Saltpool 3D 103
Veröffentlichungen
Dissertationen 235
Paper 233
Poster 234
Vertikalschnitt 41
Vierecke 52
Viskosität 19, 35, 229
Z
Zeitintegration 82
Zufallsgenerator 95
Zustandsgleichung 32